

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE
ESCOAMENTOS VISCOSOS
COMPRESSÍVEIS/QUASE INCOMPRESSÍVEIS**

POR

MARIA DE LOURDES MOREIRA

TESE

COPPE / UFRJ

D. Sc.

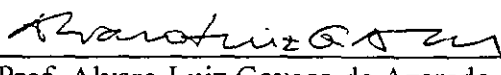
1998

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS VISCOSOS
COMPRESSÍVEIS/QUASE INCOMPRESSÍVEIS

Maria de Lourdes Moreira

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA CIVIL

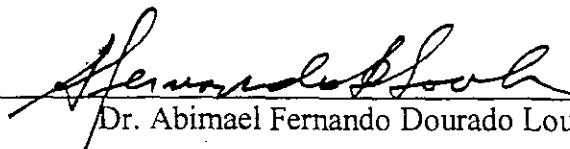
Aprovada por:



Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, DSc.
(Presidente)



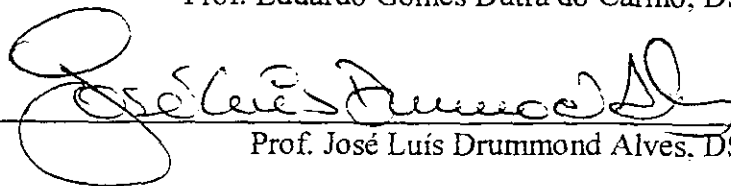
Dr. Paulo Augusto Berquó de Sampaio, PhD.



Dr. Abimael Fernando Dourado Loula, DSc.



Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, DSc.



Prof. José Luís Drummond Alves, DSc.



Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra, PhD.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

SETEMBRO DE 1998

T
0496
MORE

MOREIRA, MARIA DE LOURDES

Simulação Computacional de escoamentos Viscosos
Compressíveis/Quase Incompressíveis [Rio de Janeiro] 1998

VIII, 120 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc., Engenharia Civil,
1998)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Mecânica de Fluidos Computacional

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Aos meus pais

Ao meu esposo

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Paulo Augusto Berquó de Sampaio pela orientação, incentivo e amizade durante o desenvolvimento desta tese.

Ao Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, pela orientação, apoio e amizade para a realização desta tese.

Aos membros da Banca Examinadora pela participação e contribuições.

Ao Dr. David Adjuto Botelho pelas discussões proveitosas, incentivo e amizade para o desenvolvimento desta tese.

À Fernando L. B. Ribeiro pela concessão do programa computacional VIEW3D, que em muito facilitou o pós-processamento dos resultados apresentados nesta tese.

Ao meu esposo Rogerio pelo amor e estímulo durante o desenvolvimento desta tese.

Aos amigos do IEN, pelo agradável convívio diário que de diversas formas contribuiu para o desenvolvimento desta tese.

Ao Dr. Orlando João Agostinho Gonçalves Filho, Coordenador de Reatores do Instituto de Engenharia Nuclear (IEN), pelo apoio recebido.

Aos Professores do Programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ pelo aprendizado.

Ao Programa de Engenharia Civil da COPPE/UFRJ pelo apoio administrativo.

Ao IEN e à Comissão Nacional de Engenharia Nuclear (CNEN), pela confiança e suporte recebidos.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS VISCOSOS COMPRESSÍVEIS/QUASE INCOMPRESSÍVEIS

Maria de Lourdes Moreira

Setembro/1998

Orientadores: Paulo Augusto Berquó de Sampaio
Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Programa: Engenharia Civil

É apresentada uma nova formulação, usando a técnica de elementos finitos, para escoamentos viscosos compressíveis e/ou quase-incompressíveis. A formulação combina as seguintes variáveis dependentes conservativas e não-conservativas: velocidade mássica (densidade*velocidade), energia interna e pressão. A principal característica do método é a derivação de uma equação discretizada para a pressão, onde as contribuições para a pressão provenientes dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia são tomadas implicitamente na discretização temporal. Exemplos numéricos abrangendo uma larga faixa de número de Mach demonstram a robustez e versatilidade do novo método.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

COMPUTATIONAL SIMULATION OF COMPRESSIBLE/NEARLY INCOMPRESSIBLE VISCOUS FLOWS

Maria de Lourdes Moreira

September/1998

Advisors: Paulo Augusto Berquó de Sampaio

Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Department: Civil Engineering

A new finite element formulation designed for both compressible and nearly incompressible viscous flows is presented. The formulation combines conservative and non-conservative dependent variables, namely, the mass-velocity (density*velocity), internal energy and pressure. The central feature of the method is the derivation of a discretised equation for pressure, where pressure contributions arising from the mass, momentum and energy balances are taken implicitly in the time discretisation. Numerical examples, covering a wide range of Mach number, demonstrate the robustness and versatility of the new method.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Simulação Computacional de Mecânica de Fluidos e Transferência de Calor	1
1.2	Modelagem Física do Escoamento de Fluidos	2
1.3	Escoamentos Compressíveis e Escoamentos Incompressíveis	6
1.4	Organização da Tese	8
2	LEIS DE CONSERVAÇÃO	10
2.1	Equações Constitutivas	11
2.2	As Equações de Navier-Stokes	12
2.3	Equações de Conservação para uma Mistura Bifásica	19
3	ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS: DIFICULDADES	23
3.1	A Escala de Tempo da Pressão	23
3.2	Compatibilidade das Interpolações para Velocidade e Pressão	24
4	UMA METODOLOGIA PARA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS E/OU QUASE-INCOMPRESSÍVEIS	29
4.1	O Modelo do Meio Contínuo	29
4.2	Esquemas de Discretização e Solução	37
4.3	Particularização para Gás Perfeito	50
4.4	Passo de Tempo Local	53
4.5	Remalhagem Adaptativa	57
5	EXEMPLOS NUMÉRICOS	59

5.1	Resultados para Gás Perfeito	59
5.2	Resultados para Mistura Água-Vapor	78
6	COMENTÁRIOS FINAIS	86
APÊNDICE A - MÉDIA VOLUMÉTRICA DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO PARA ESCOAMENTO BIFÁSICO		88
APÊNDICE B - REMALHAGEM ADAPTATIVA		101
APÊNDICE C - PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DA MISTURA BIFÁSICA		106
APÊNDICE D - REGRA DE LEIBNIZ, GRADIENTE MÉDIO E DIVERGENTE MÉDIO		113

1 INTRODUÇÃO

1.1 Simulação Computacional de Mecânica de Fluidos e Transferência de Calor

Problemas que envolvem mecânica de fluidos e transferência de calor são importantes em diversas áreas da Engenharia. Projetistas e analistas freqüentemente deparam-se com situações de natureza física complexa e escoamentos através de arranjos geométricos complicados [1]. Em geral, os problemas não podem ser resolvidos através de técnicas analíticas e demandam o desenvolvimento e a aplicação de métodos numéricos e experimentais.

Para tratar de escoamentos de complexidade industrial, a Engenharia tradicionalmente faz uso de modelos simplificados, ajustados aos sistemas em estudo através de correlações empíricas. Por outro lado, o rápido desenvolvimento dos computadores vem possibilitando cada vez mais a utilização de modelos de maior generalidade na simulação computacional, ampliando a gama de aplicação dos programas e reduzindo a necessidade do uso de correlações experimentais de validade limitada. Enquanto os métodos tradicionais de Engenharia apoiam-se em modelos simplificados e adaptados a condições específicas, na *simulação computacional de mecânica de fluidos* procura-se modelar o próprio meio contínuo através de suas equações constitutivas.

É bem verdade que o atual estágio de desenvolvimento dos computadores ainda não permite a simulação direta de escoamentos multifásicos ou turbulentos em toda sua complexidade, sendo necessário o uso de pseudo equações constitutivas e ajuste experimental para fechamento dos modelos empregados. Ainda assim, os modelos físicos utilizados na *simulação computacional de mecânica de fluidos* tendem a ser mais genéricos e de aplicação mais abrangente do que os modelos simplificados da prática tradicional. Este ganho de generalidade permite um melhor aproveitamento dos dados experimentais levantados no laboratório, bem como um melhor planejamento do próprio esforço experimental necessário para a obtenção de resultados confiáveis.

O uso de métodos computacionais para análise de problemas envolvendo mecânica de fluidos e transferência de calor vem crescendo rapidamente nos últimos anos. A expansão do uso destes métodos é alimentado pelo desenvolvimento dos computadores,

mas a principal motivação é, sobretudo, econômica. A indústria aeronáutica foi a primeira a beneficiar-se das vantagens associadas ao uso de métodos computacionais para mecânica de fluidos. A utilização destas técnicas permitiu a redução do número de horas de ensaio em túnel de vento, necessárias para o desenvolvimento de novos produtos.

No caso da indústria nuclear, note-se que a maioria das atuais usinas PWR foi projetada ainda nos anos sessenta, antes do amadurecimento da simulação computacional como ferramenta poderosa para análise e projeto. Em particular, o projeto termohidráulico dessas plantas foi realizado através de modelos simplificados e de grande número de experimentos, cujos principais resultados têm sido mantidos como segredo industrial. No entanto, a pesquisa para o desenvolvimento de novas tecnologias a partir de meados dos anos setenta, tais como a de reatores intrinsecamente seguros e a de reatores regeneradores rápidos, já revela a crescente utilização de técnicas para simulação computacional [2] e [3]. Recentemente estas técnicas têm facilitado o entendimento e a previsão de alguns problemas observados nos projetos mais antigos, com importantes conseqüências para o licenciamento [4] e [5].

1.2 Modelagem Física do Escoamento de Fluidos

Devido a abundância de modelos de escoamento disponíveis para utilização na prática da Engenharia, é conveniente considerar uma classificação que facilite o entendimento das hierarquias e relações existentes entre eles. Apresentamos a seguir os níveis de aproximação aplicados na construção de modelos de escoamento, de acordo com a classificação proposta por HIRSCH [6].

O *nível da realidade* está ligado às várias descrições utilizadas para retratar o mundo físico. Isto vai desde a escala subatômica, passando pelas escalas atômica ou molecular, macroscópica (a escala da mecânica clássica) até a escala astronômica. Cada nível de descrição tem seu próprio conjunto característico de variáveis dependentes. O movimento estatístico de um gás rarefeito é convenientemente descrito através de variáveis tais como velocidade molecular, massa molecular e número de moléculas por unidade de volume, entre outras. Neste nível não é possível lidar apropriadamente com

os conceitos macroscópicos de fluido e escoamento de fluido. De fato, a dinâmica de fluidos começa a existir quando o número de interações entre as moléculas aumenta e a idéia de um movimento médio torna-se significativo. A partir deste ponto, atinge-se a mecânica do contínuo, onde o conceito de partícula de fluido é axiomático e não requer qualquer referência ao mundo microscópico de átomos e moléculas [7].

Por outro lado, é interessante observar que quantidades macroscópicas tais como pressão e temperatura, por exemplo, podem ser interpretadas como resultados de médias sobre um grande número de interações entre moléculas, que ocorrem no nível microscópico. As médias tem um papel importante no estabelecimento da hierarquia e das relações entre os modelos de escoamento. No entanto, médias causam perda de informação: mais e mais complementação empírica torna-se necessária à medida que novas médias são tomadas. Este é o caso da mecânica do contínuo, quando confrontada com a aproximação microscópica estatística. Além dos balanços fundamentais de massa, quantidade de movimento e energia, o modelo do meio contínuo requer dados empíricos adicionais a respeito do fluido em estudo, introduzidos através de equações constitutivas. Enquanto os balanços fundamentais têm caráter universal, as equações constitutivas caracterizam classes de fluidos com um mesmo tipo de comportamento (fluido Newtoniano, por exemplo).

A grande maioria dos problemas de escoamento de interesse da Engenharia, incluindo escoamentos bifásicos e turbulentos, pode ser apropriadamente modelada no nível da mecânica do contínuo. Para fluidos Newtonianos, isto resulta em um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) conhecidas por equações de Navier-Stokes. Em outros casos, novos níveis de aproximação são necessários, sobretudo por razões econômicas.

O *nível temporal* esta relacionado com a resolução temporal requerida do modelo de escoamento. Isto envolve a escolha de uma constante de tempo apropriada à descrição do sistema de escoamento considerado. Médias temporais dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia podem ser escritas integrando-se as leis de conservação sobre todas as escalas de tempo menores que a constante de tempo escolhida. Esses balanços resultam em um descrição do movimento do fluido em termos de variáveis médias no tempo. Mais uma vez, essas médias causam perda de informação

de modo que os modelos necessitam complementação através de dados externos adicionais.

O melhor exemplo desta classe de aproximação são as equações médias de Reynolds. Essas equações médias, obtidas das equações de Navier-Stokes integradas no tempo, são freqüentemente usadas em Mecânica de Fluidos Computacional (CFD-sigla inglesa para *Computational Fluid Dynamics*), quando se está lidando com turbulência. Diversos modelos de turbulência têm sido usados em conjunto com as equações de Reynolds, desde simples expressões algébricas até sistemas de equações diferenciais parciais [6].

O *nível espacial* de aproximação está relacionado com o número de variáveis espaciais usadas para descrever o escoamento. Na realidade, todo escoamento é tridimensional. No entanto, modelos simplificados são obtidos fazendo-se uma média das leis de conservação fundamentais ao longo de uma ou duas dimensões espaciais. Em geral, os modelos com dimensões espaciais reduzidas requerem dados externos empíricos, para que efeitos da tridimensionalidade do escoamento sejam reintroduzidos.

Um exemplo do uso de modelos bidimensionais vem das equações para águas rasas (*shallow water equations*) [8]. Essas equações são aplicadas em escoamentos em baías e portos. O modelo é obtido tomando-se uma média das equações de Navier-Stokes ao longo da profundidade da água. Devido à integração envolvida na obtenção das equações, este modelo requer informações externas que levem em conta as forças superficiais do vento e o fator de fricção no fundo do mar.

Na engenharia nuclear, modelos unidimensionais são freqüentemente usados em escoamentos dentro de tubulações e canais no núcleo de reatores nucleares. Efeitos tridimensionais são introduzidos através de fatores de fricção, correlações de transferência de calor e coeficientes de perda de pressão localizada (expansões, contrações e curvas encontradas em tubulações).

O próximo nível de aproximação a ser considerado é o *nível dinâmico*. Este nível de aproximação diz respeito à importância relativa entre as forças que governam o escoamento. Dependendo da importância relativa de uma determinada força, esta pode ser desconsiderada, resultando em uma descrição matemática mais simples.

Em problemas de lubrificação, onde os efeitos viscosos são dominantes, as forças de inércia são normalmente desprezadas. Em outros casos, modelos simplificados são aplicados em diferentes regiões do escoamento. Um exemplo disto é a aproximação da camada limite de Prandtl para a análise de escoamentos viscosos externos. Neste caso, uma aproximação para escoamento invíscido é corrigida para levar em conta os efeitos viscosos em regiões próximas de paredes sólidas [9].

Além dos níveis de modelagem descritos acima, pode-se considerar também o *nível de homogeneidade*, aplicável a escoamentos multifásicos e a escoamentos em meios porosos [10]. As equações do modelo são obtidas tomando-se a média das equações de conservação em volumes contendo misturas de diferentes materiais. Dados externos contendo informações sobre as interfaces dos materiais são necessários. Por exemplo, correlações para escoamentos bifásicos devem considerar não só a fração volumétrica das fases, mas também o padrão específico do escoamento bifásico (bolhas, anular, bolsões, etc.).

Há alguns pontos que devem ser enfatizados com relação aos níveis de aproximação discutidos acima. Primeiramente, note-se que a grande maioria dos escoamentos de interesse da Engenharia pode ser convenientemente descrita no domínio da mecânica do contínuo. Logo, a descrição do contínuo pode ser considerada como o *modelo maior*, de onde sub-modelos podem ser derivados através de médias e/ou suposições sobre a importância relativa das várias forças que governam o escoamento. Em segundo, note-se que vários níveis de aproximação podem estar presentes, simultaneamente, nos modelos de escoamento. Os modelos unidimensionais da engenharia nuclear incluem tanto o *nível temporal* quanto o *nível espacial*, para escoamento de uma única fase, incluindo ainda o nível de aproximação de *homogeneidade* para problemas multifásicos.

O mais importante é ter em mente que quanto mais aproximações são feitas, mais os modelos tornam-se dependentes de dados empíricos de validade limitada. No *nível do contínuo*, experiências são necessárias apenas para a descrição do comportamento do fluido, independentemente de características particulares do escoamento. Por outro lado, modelos simplificados perdem sua generalidade pelo uso de correlações que misturam o comportamento do fluido com padrões específicos de escoamento.

1.3 Escoamentos Compressíveis e Escoamentos Incompressíveis

A maior parte das aplicações de mecânica de fluidos pode ser classificada em uma de duas grandes áreas: escoamentos compressíveis ou escoamentos incompressíveis. Em geral, o escoamento de líquidos é aproximado como incompressível enquanto que o escoamento de gases é tomado como compressível. No entanto, mesmo líquidos apresentam alguma compressibilidade e o escoamento de gases a baixas velocidades pode ser aproximado como incompressível. Enfim, não há uma linha divisória clara que permita uma distinção absoluta entre escoamento compressível e escoamento incompressível. A escolha entre considerar ou não efeitos de compressibilidade depende principalmente do tipo de problema que se tem em mãos. Assim, o estudo de explosões subaquáticas requer o modelo compressível, enquanto que o cálculo do coeficiente de arraste de um automóvel pode ser obtido via modelo incompressível [11].

Em alguns problemas de interesse, porém, o escoamento apresenta os comportamentos compressível e quase-incompressível em partes diferentes do mesmo domínio de análise. Este é o caso, por exemplo, do vazamento de vapor à partir de um vaso de pressão contendo água pressurizada. Além disso, mesmo os velozes escoamentos da indústria aeronáutica apresentam o comportamento quase-incompressível em regiões onde a velocidade local aproxima-se de zero, como no interior de camadas limite e junto a pontos de estagnação.

É importante ressaltar que a questão da compressibilidade não limita-se apenas ao aspecto físico, mas repercute diretamente nas características matemáticas das equações que representam o modelo. Na prática, escoamentos quase-incompressíveis são usualmente tratados como incompressíveis. Desta forma, os efeitos da compressibilidade são eliminados de início, antes mesmo da utilização de qualquer método de discretização específico. Isto é conseguido através de uma mudança do modelo físico (e matemático), onde a equação de conservação de massa original e a equação de estado do fluido são substituídas pela condição de incompressibilidade, estabelecendo que o campo de velocidade seja solenoidal ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$). Neste contexto, a pressão deixa de ser uma propriedade termodinâmica relacionada com a densidade através da equação de estado, e a descrição termodinâmica do fluido é perdida. Do ponto de vista matemático, o comportamento hiperbólico da pressão, manifestado

através da propagação de ondas de pressão, desaparece por completo. No modelo incompressível a pressão adquire o carácter elíptico, sendo determinada a partir de condições de contorno e da conservação da quantidade de movimento, de tal forma que a condição $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ seja satisfeita.

Em razão da mudança do carácter matemático das equações governantes, não causa surpresa o fato de que métodos numéricos para escoamento compressível e para escoamento incompressível tenham tido desenvolvimentos independentes. A literatura reflete esta dicotomia e a maior parte dos trabalhos publicados destinam-se especificamente a aplicações compressíveis ou a aplicações incompressíveis. Apenas recentemente intensificou-se o interesse por esquemas numéricos apropriados para toda faixa de velocidades. KARKI e PATANKAR [12] e MALISKA e SILVA [13] desenvolveram métodos de volumes finitos baseados na pressão como variável dependente, através da extensão de esquemas originalmente desenvolvidos para problemas incompressíveis. Os trabalhos de CHEN e PLETCHER [14] e AZEVEDO e MARTINS [15], por outro lado, são exemplos clássicos de métodos de volume finitos para escoamento compressível, modificados para tratar escoamentos incompressíveis. No campo dos elementos finitos, ZIENKIEWICZ e CODINA [16] usaram passos de tempo fracionados (*fractional steps/operator splitting*) e o método de Galerkin ao longo de linhas características (*characteristic-Galerkin*) no desenvolvimento de uma formulação aplicável para todas as velocidades. HAUKE e HUGHES [11] apresentaram um estudo comparativo entre alguns conjuntos de variáveis para solução de escoamentos compressíveis e incompressíveis, utilizando o método Galerkin/mínimos quadrados (*Galerkin/least squares*).

O presente trabalho apresenta uma nova formulação de elementos finitos para escoamentos viscosos compressíveis e/ou quase-incompressíveis. A formulação combina as seguintes variáveis conservativas e não-conservativas a saber: a velocidade mássica (densidade*velocidade), a energia interna e a pressão. A característica principal do método é a derivação de uma equação discretizada para pressão, onde as contribuições de pressão provenientes dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia são tomadas de forma implícita na discretização temporal.

São apresentadas aplicações em dinâmica de gases e na simulação de escoamentos de misturas bifásicas água-vapor. Os exemplos numéricos, cobrindo uma ampla faixa de números de Mach, demonstram a versatilidade e a robustez do novo método.

1.4 Organização da Tese

O capítulo 1 apresenta considerações gerais sobre a importância da Mecânica de Fluidos Computacional (CFD). Inclui também uma discussão sobre os aspectos físicos da modelagem do escoamento de fluidos e sobre os recentes esforços para o desenvolvimento de métodos de discretização aplicáveis para toda faixa de velocidades.

No capítulo 2 são apresentadas as equações de balanço de massa, de quantidade de movimento e de energia. Também são apresentados os modelos utilizados para modelagem de turbulência e escoamento de misturas bifásicas.

O capítulo 3 discute as principais dificuldades encontradas no desenvolvimento de métodos de discretização aplicáveis para análise de escoamentos quase-incompressíveis.

O capítulo 4 descreve a nova metodologia desenvolvida para escoamentos compressíveis e/ou quase-incompressíveis. São apresentadas a formulação matemática, o modelo discreto, o esquema de solução, bem como os métodos adaptativos implementados no programa computacional.

No capítulo 5 são mostrados exemplos numéricos. Aplicações envolvendo dinâmica de gases e escoamentos bifásicos água-vapor são apresentadas.

O capítulo 6 apresenta conclusões e comentários finais, bem como sugestões para o prosseguimento da pesquisa.

O apêndice A apresenta alguns conceitos básicos a respeito da modelagem proposta para escoamento bifásico. O apêndice B apresenta a técnica de remalhagem adaptativa utilizada no programa implementado. No apêndice C são apresentadas as propriedades

termodinâmicas da mistura bifásica. O apêndice D apresenta alguns conceitos matemáticos necessários para complementar a exposição mostrada no apêndice A.

2 LEIS DE CONSERVAÇÃO

Neste capítulo são apresentadas as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. As equações a seguir baseiam-se em uma descrição Euleriana, onde as propriedades características do meio são consideradas funções do espaço e do tempo. O problema é definido no volume de controle fixo Ω , com fronteira Γ [17].

Conservação de massa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, d\Omega + \int_{\Gamma} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = 0$$

eq. 2-1

Conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \, d\Omega + \int_{\Gamma} [(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \rho \mathbf{u} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}] \, d\Gamma = \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} \, d\Omega$$

eq. 2-2

Conservação de energia

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho E \, d\Omega + \int_{\Gamma} [\rho E \mathbf{u} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{q}] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, d\Omega$$

eq. 2-3

onde t é o tempo, ρ é a densidade, \mathbf{u} é o vetor velocidade, \mathbf{T} é o tensor tensão, E é a energia total específica, \mathbf{q} é o vetor fluxo de calor, \mathbf{f} são as forças externas, e \mathbf{n} é o vetor unitário no sentido de saída normal a fronteira Γ . A equação de energia é válida assumindo-se que não existe nenhuma fonte de energia em Ω .

A energia total específica é dada por:

$$E = e + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2$$

eq. 2-4

onde e é a energia interna específica.

2.1. Equações Constitutivas

As equações constitutivas podem ser classificadas em leis constitutivas intrínsecas e leis constitutivas externas.

As leis constitutivas intrínsecas de interesse são as equações de estado e as relações que estabelecem o tensor tensão e o fluxo de calor em termos das variáveis dependentes. Por outro lado, as leis constitutivas externas são geralmente dadas por correlações empíricas. Estas envolvem circunstâncias que não são intrínsecas ao fluido e que dependem tanto de propriedades do fluido quanto de características específicas do escoamento. Geralmente, essas correlações são introduzidas para que os efeitos globais de troca de calor e quantidade de movimento possam ser reintroduzidos em modelos simplificados.

Uma primeira lei constitutiva necessária para a solução das equações de conservação é a que determina o tensor tensão. Por exemplo, para um fluido Newtoniano o tensor tensão tem a seguinte forma,

$$\mathbf{T} = -P \mathbf{I} + \mathbf{S}$$

eq. 2-5

onde P é a pressão termodinâmica, \mathbf{I} é o tensor identidade, \mathbf{S} é o tensor viscoso dado por:

$$\mathbf{S} = -\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$$

eq. 2-6

onde μ é a viscosidade do fluido.

Uma segunda relação constitutiva é dada pela lei de Fourier para fluxo de calor. Ela determina a relação entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura.

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

eq. 2-7

onde k é a condutividade térmica do fluido e T é a temperatura.

2.2 As Equações de Navier-Stokes

As propriedades do meio não são necessariamente funções contínuas do espaço e do tempo. Se elas forem contínuas e suficientemente diferenciáveis em um domínio contínuo do tempo e do espaço, então as equações de conservação na forma integral (eq. 2-1 a eq. 2-3) podem ser transformadas em um conjunto de equações diferenciais parciais através do teorema da divergência.

Equações de Navier-Stokes na Forma Conservativa

Considerando o volume fixo Ω contido no espaço Euclidiano com nde dimensões espaciais, pode-se escrever as equações, na forma de divergente ou forma conservativa, usando a convenção de soma para $a = 1, \dots, nde$ e $b = 1, \dots, nde$ [17]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_a} (\rho u_a) = 0$$

eq. 2-8

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_a) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\rho u_a u_b - T_{ab}) = \rho f_a$$

eq. 2-9

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\rho E u_b - T_{ab} u_a + q_b) = \rho u_b f_b$$

eq. 2-10

Nas equações acima, u_a é a componente da velocidade do fluido, T_{ab} é a componente do tensor tensão, f_a é a componente das forças externas, q_b é a componente do fluxo de calor.

Equações de Navier-Stokes na Forma Não Conservativa

Seja $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_a \frac{\partial}{\partial x_a}$ a derivada material, isto é a derivada temporal observada seguindo a trajetória de uma partícula fixa. As equações de conservação podem ser escritas da seguinte forma alternativa:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial}{\partial x_a} u_a = 0$$

eq. 2-11

$$\rho \frac{Du_a}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_b} T_{ab} = \rho f_a$$

eq. 2-12

$$\rho \frac{De}{Dt} - T_{ab} \frac{\partial}{\partial x_b} u_a + \frac{\partial}{\partial x_b} q_b = \rho u_b f_b$$

eq. 2-13

2.2.1 Equações de Navier-Stokes para Escoamento Incompressível

As equações para escoamento incompressível representam um caso particular das equações de Navier-Stokes para escoamento compressível. O escoamento incompressível é caracterizado pela condição

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u_a}{\partial x_a} = 0$$

eq. 2-14

Quando esta condição (eq. 2-14) é introduzida na equação de conservação de massa (eq. 2-8 ou eq. 2-11) tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_a \frac{\partial \rho}{\partial x_a} = 0$$

eq. 2-15

ou

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0$$

eq. 2-16

A eq. 2-16 indica que a densidade não varia ao longo da trajetória de uma partícula do fluido. Na maioria dos casos assume-se que ρ é constante, de forma que esta condição é satisfeita identicamente em todos os pontos. No entanto para a análise de escoamentos estratificados, é freqüentemente empregada uma ligeira perturbação na densidade, ρ' , em torno de uma densidade média constante ρ_0 , de forma que $\rho = \rho_0 + \rho'$. Esta

aproximação deve ser realizada com cuidado, porém, para que seja consistente com as equações de transporte.

Utilizando-se a eq. 2-14, o tensor viscoso dado pela eq. 2-6 fica reduzido a

$$S_{ab} = \mu \left(\frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a} \right)$$

eq. 2-17

Assim, para o caso de viscosidade constante a equação de quantidade de movimento (eq. 2-9) torna-se:

$$\rho \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_b} (u_a u_b) \right] + \frac{\partial P}{\partial x_a} - \mu \frac{\partial^2 u_a}{\partial x_b \partial x_b} = \rho f_a$$

eq. 2-18

A equação eq. 2-18 pode ser transformada, usando-se a eq. 2-14, para obter uma forma não conservativa (ou forma convectiva) da Equação de Navier-Stokes para escoamento incompressível.

$$\rho \left[\frac{\partial u_a}{\partial t} + u_b \frac{\partial u_a}{\partial x_b} \right] + \frac{\partial P}{\partial x_a} - \mu \frac{\partial^2 u_a}{\partial x_b \partial x_b} = \rho f_a$$

eq. 2-19

A equação de energia pode ser utilizada posteriormente para determinar a distribuição da temperatura. O desacoplamento da equação de energia das equações de continuidade e de quantidade de movimento é a principal característica do modelo incompressível.

2.2.2 As Equações Médias de Reynolds

A aproximação padrão para simulação numérica de escoamentos turbulentos (com altos números de Reynolds), consiste em resolver as equação de Navier-Stokes na forma de médias. Em particular, para escoamentos compressíveis, emprega-se a média ponderada em massa de FAVRE [18]. Para uma quantidade f , define-se um valor médio ponderado

pela massa $\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}$, onde a barra superior indica uma média convencional no tempo.

Assim, um valor instantâneo pode ser escrito como $f = \tilde{f} + f''$, onde f'' é a parte flutuante.

Partindo das equações de Navier-Stokes na forma conservativa e negligenciando as forças externas, as equações médias de Reynolds podem ser escritas como [18]

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_a} (\bar{\rho} \tilde{u}_a) = 0$$

eq. 2-20

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_a) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{\rho} \tilde{u}_a \tilde{u}_b) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{\rho} u_a'' u_b'') + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_a} - \frac{\partial \bar{S}_{ab}}{\partial x_b} = 0$$

eq. 2-21

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{\rho} \tilde{u}_b \tilde{H} + \bar{\rho} u_b'' H'') + \bar{q}_b - \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{u}_a S_{ab}) = 0$$

eq. 2-22

onde $H = E + \frac{P}{\rho}$ é a entalpia total.

Note que nas equações acima o procedimento de média introduz os termos $\overline{\rho u_a'' u_a''}$, $\overline{\rho u_b'' H''}$ e $\overline{u_a S_{ab}}$. Como esses novos termos são desconhecidos, o sistema de equações

acima não pode ser resolvido. Para fechar o sistema de equações, esses novos termos precisam ser modelados.

O termo $\overline{\rho u''_a u''_a}$ é chamado de tensor aparente de Reynolds. Neste trabalho, este tensor é representado de acordo com a aproximação original de Boussinesq:

$$S'_{ab} = -\overline{\rho u''_a u''_a} = -\mu_t \left(\frac{2}{3} \delta_{ab} \frac{\partial \tilde{u}_c}{\partial x_c} \right) + \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_a}{\partial x_b} + \frac{\partial \tilde{u}_b}{\partial x_a} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ab} \frac{\overline{\rho u''_c u''_c}}{2}$$

eq. 2-23

O último termo na equação acima está associado a energia cinética das flutuações de velocidade. No modelo adotado aqui este termo é incorporado na pressão média \bar{P} .

Assim, a equação média de quantidade de movimento pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_a) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{\rho} \tilde{u}_a \tilde{u}_b) - \frac{\partial}{\partial x_b} (S_{ab}^{eff}) + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_b} = 0$$

eq. 2-24

onde

$$S_{ab}^{eff} = \bar{S}_{ab} + S'_{ab}$$

Os termos $\overline{\rho u'' u'' H''}$ e $\overline{u''_a S_{ab}}$ são modelados conjuntamente, como mostrado a seguir:

$$\overline{\rho u'' u'' H''} - \overline{u''_a S_{ab}} = q'_b - \tilde{u}_a S_{ab}^{eff}$$

eq. 2-25

O termo q'_b pode ser interpretado como um fluxo de calor associado a turbulência, sendo modelado como

$$q'_b = -k_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_b}$$

eq. 2-26

Desta forma, a equação de energia torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{E}) + \frac{\partial}{\partial x_b} (\bar{\rho} \tilde{u}_b \tilde{H}) - \frac{\partial}{\partial x_b} \left(k_{eff} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_b} \right) - \frac{\partial}{\partial x_b} (\tilde{u}_a S_{ab}^{eff}) = 0$$

eq. 2-27

onde

$$k_{eff} = k + k_t$$

eq. 2-28

Neste trabalho, usa-se a hipótese de Smagorinsky para modelagem da viscosidade turbulenta [19]. Esta hipótese é razoável para análise bidimensional, mas não é suficiente para análises tridimensionais [20].

$$\mu_t = \bar{\rho} c h^2 \sqrt{\left(\frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a} \right) \left(\frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a} \right)}$$

eq. 2-29

onde h é o tamanho local da malha [21]. Na referência [19], sugere-se $c \cong 0,01$.

Para avaliar a condutividade térmica turbulenta k_t , um número de Prandtl turbulento Pr_t é introduzido

$$Pr_t = \frac{c_p \mu_t}{k_t}$$

eq. 2-30

Como sugerido por LESIER [22], usa-se $Pr_t = 0,6$.

2.3 Equações de Conservação para uma Mistura Bifásica

Esta seção apresenta o modelo de mistura que é utilizado neste trabalho para a simulação de escoamentos bifásicos. São consideradas as equações médias de Reynolds deduzidas na seção anterior, onde os símbolos \sim , $\bar{\cdot}$ e \cdot foram eliminados para simplificar a notação. As equações médias volumétricas locais são deduzidas a partir das equações de conservação para cada fase, como mostrado no apêndice A. As equações médias volumétricas locais para conservação de massa, quantidade de movimento e energia são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) = 0$$

eq. 2-31

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2) + \\ & - \nabla \cdot [-(\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2) \mathbf{I} + (\alpha_1 \mathbf{S}_1 + \alpha_2 \mathbf{S}_2)] - (\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2) \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. 2-32

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_2 \rho_2 E_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 H_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 H_2) + \\ & - \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{q}_1 + \alpha_2 \mathbf{q}_2) - (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. 2-33

Os subscritos "1" e "2" representam as fases 1 e 2 respectivamente, α é a fração em volume, ρ é a densidade, P é a pressão termodinâmica, \mathbf{u} é o vetor velocidade, \mathbf{S} é o

tensor viscoso, \mathbf{g} é a força gravitacional, E é a energia total, H é a entalpia total e \mathbf{q} é o fluxo de calor.

Modela-se a mistura bifásica de acordo com

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2$$

eq. 2-34

$$\rho \mathbf{u} = \alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2$$

eq. 2-35

$$\rho E = \alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_2 \rho_2 E_2$$

eq. 2-36

$$P = \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2$$

eq. 2-37

$$\mathbf{S} = \alpha_1 \mathbf{S}_1 + \alpha_2 \mathbf{S}_2$$

eq. 2-38

$$\mathbf{q} = \alpha_1 \mathbf{q}_1 + \alpha_2 \mathbf{q}_2$$

eq. 2-39

Usando as definições acima, as equações de conservação podem ser escritas como [23]:

Conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

eq. 2-40

Conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right) \mathbf{u}_r \mathbf{u}_r \right) - \nabla \cdot (-P \mathbf{I} + \mathbf{S}) - \rho \mathbf{g} = 0$$

eq. 2-41

Conservação de energia

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} H + \alpha_1 \alpha_2 \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right) \mathbf{u}_r (\Delta H) \right) + \\ & - \nabla \cdot \left(\mathbf{S} \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} [\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \mathbf{S}_2 - \alpha_1 \alpha_2 \rho_2 \mathbf{S}_1] \cdot \mathbf{u}_r \right) + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. 2-42

onde

$$\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1$$

eq. 2-43

$$H_k = E_k + \frac{P_k}{\rho_k} = \left(e_k + \frac{1}{2} \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_k \right) + \frac{P_k}{\rho_k} = h_k + \frac{1}{2} \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{u}_k$$

eq. 2-44

$$\Delta H = H_2 - H_1$$

eq. 2-45

Note que as equações de conservação de quantidade de movimento e de energia requerem a especificação da velocidade de deslizamento entre as fases \mathbf{u}_r . Para problemas em uma dimensão, há correlações experimentais estabelecidas que permitem determinar \mathbf{u}_r em termos das variáveis médias [24]. Por outro lado, na ausência de correlações apropriadas para o caso multidimensional, adota-se aqui o modelo de não-deslizamento (*no slip*).

Uma aproximação consistente com o modelo de não-deslizamento é considerar:

$$\Delta H = L = h_2 - h_1$$

eq. 2-46

onde L é o calor latente de vaporização

Desta forma, para $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1 = \mathbf{0}$, as seguintes equações de conservação de quantidade de movimento e de energia são utilizadas para o escoamento da mistura bifásica:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla \cdot (-P \mathbf{I} + \mathbf{S}) - \rho \mathbf{g} = \mathbf{0}$$

eq. 2-47

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) - \nabla \cdot (\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} = 0$$

eq. 2-48

Observe que após a modelagem da mistura bifásica, as equações de conservação resultantes (eq. 4-40, eq. 4-47 e eq. 4-48) são idênticas às equações para escoamento monofásico.

Deve-se ressaltar que para o modelo de mistura adotado neste trabalho é considerado o equilíbrio termodinâmico entre as fases, onde as pressões de cada fase são iguais. Durante a mudança de fase, as propriedades da mistura são descritas no Apêndice C.

3 ESCOAMENTOS QUASE-INCOMPRESSÍVEIS: DIFICULDADES

Como visto no capítulo 2, as equações de Navier-Stokes para escoamento incompressível constituem uma aproximação particular das equações de Navier-Stokes para escoamento compressível. Deste modo, parece razoável esperar que métodos adequados para problemas compressíveis possam ser usados diretamente, e sem maiores preocupações, na simulação de escoamentos incompressíveis. Em geral, porém, este não é o caso. Este capítulo aborda as principais dificuldades que devem ser superadas para que formulações para escoamento compressível possam ser empregadas até o limite da incompressibilidade.

3.1 A Escala de Tempo da Pressão

Para escoamentos quase-incompressíveis (baixo número de Mach) as ondas de pressão propagam-se muito mais rapidamente que o movimento do fluido. Nestes casos, formulações que aproximam a pressão explicitamente tornam-se ineficientes, pois requerem um passo de tempo extremamente pequeno para garantir a estabilidade do cálculo numérico.

Métodos explícitos para solução das equações compressíveis de Euler e Navier-Stokes, são limitados a um passo de tempo menor do que aquele dado pela condição de estabilidade de CFL (Courant, Friedrichs e Lewy) [25],

$$\Delta t \leq (\Delta t)_{CFL} = \frac{h}{\|\mathbf{u}\| + a}$$

eq. 3-1

onde a é a velocidade local do som, h é o tamanho local da malha e \mathbf{u} é a velocidade local do fluido.

A equação acima indica que quando a velocidade do som tende a infinito e o número de Mach tende a zero (escoamento incompressível), o passo de tempo necessário para manter a estabilidade do cálculo explícito tende a zero.

Uma alternativa para evitar a severa restrição imposta pela eq. 3-1 é incluir a pressão como variável dependente, tomando-a de modo implícito na discretização temporal. Tal procedimento é comum aos trabalhos de KARKI e PATANKAR [12], MALISKA e SILVA [13], CHEN e PLETCHER [14], AZEVEDO e MARTINS [15] e ZIENKIEWICZ e CODINA [16].

3.2 Compatibilidade das Interpolações para Velocidade e Pressão

Mesmo quando métodos implícitos são empregados, é preciso verificar se há restrições quanto a escolha das interpolações para velocidade e pressão. A medida que o número de Mach aproxima-se de zero, é preciso utilizar espaços de interpolação compatíveis segundo à condição de Babuška-Brezzi [26]. Alternativamente deve-se garantir que, no limite da incompressibilidade, o método para escoamento compressível recaia em uma formulação estabilizada que permita igual ordem de interpolação.

Esta seção discute a compatibilidade que deve existir entre as interpolações para velocidade e pressão, para que se possa obter convergência quando a formulação mista é empregada para escoamento incompressível. Como será mostrado a seguir, não é qualquer combinação de interpolações espaciais que funciona. Em particular, o uso de interpolações de mesma ordem para todas as variáveis, embora atraente do ponto de vista da implementação computacional, não conduz a resultados estáveis.

Uma condição necessária para a estabilidade da formulação mista é mostrada a seguir. Não é preciso considerar as equações de Navier-Stokes completas para identificar a questão da compatibilidade entre as interpolações espaciais para velocidade e pressão no limite incompressível. De fato, basta considerar o problema linear de Stokes, obtido assumindo $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ e desconsiderando os termos transiente e convectivo na equação eq. 2-19.

A formulação mista para o problema de Stokes conduz à seguinte forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^t & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \end{bmatrix}$$

eq. 3-2

onde \mathbf{a} e \mathbf{p} são parâmetros livres (graus de liberdade) associados com os campos de velocidade e pressão, respectivamente. As condições de contorno e forças externas são introduzidas em \mathbf{f}_1 e \mathbf{f}_2 . Assume-se que existem n_a parâmetros de velocidade e n_p parâmetros de pressão, de forma que as matrizes \mathbf{B} , \mathbf{C} e \mathbf{C}^t têm dimensões $n_a \times n_a$, $n_a \times n_p$, $n_p \times n_a$. A matriz \mathbf{B} representa a discretização da forma bilinear correspondente ao Laplaciano da velocidade no problema de Stokes. Para um problema bem posto a matriz \mathbf{B} é simétrica positiva definida e pode ser invertida.

Utilizando a eq. 3-2, pode-se escrever:

$$\mathbf{H} \mathbf{p} = \mathbf{C}^t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{f}_1 - \mathbf{f}_2$$

eq. 3-3

$$\mathbf{H} = \mathbf{C}^t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C}$$

eq. 3-4

Da eq. 3-4 observa-se que a matriz \mathbf{H} não pode ter posto maior do que n_a , o posto da matriz \mathbf{B}^{-1} . No entanto, é preciso que o posto de \mathbf{H} seja igual a n_p para que exista uma solução única para a pressão, como indica a eq. 3-3. Deste modo, a desigualdade abaixo é uma condição necessária para a estabilidade:

$$n_p \leq n_a$$

eq. 3-5

Embora necessária, esta condição não é suficiente para garantir a não-singularidade da matriz \mathbf{H} . A matrix do sistema (eq. 3-2) ainda pode ser singular, a menos que

$$\mathbf{C} \mathbf{p} \neq \mathbf{0} \text{ para todo } \mathbf{p} \neq \mathbf{0}$$

eq. 3-6

A condição necessária e suficiente para satisfazer as condições descritas pelas equações eq. 3-5 e eq. 3-6 é a condição de Babuška-Brezzi [26]. No entanto, basta observar a condição necessária eq. 3-5 para concluir que os espaços de interpolação para velocidade e pressão não podem ser escolhidos arbitrariamente. Apenas para determinadas escolhas dos espaços de interpolação, a condição dada pela eq. 3-5 pode ser garantida para quaisquer condições de contorno bem postas (ZIENKIEWICZ *et. al.* [27]). Em particular, note que a utilização da mesma ordem de interpolação para velocidade e pressão fica inviabilizada, pois basta que haja mais parâmetros prescritos de velocidade do que parâmetros prescritos de pressão para que a condição dada pela eq. 3-5 seja violada.

Por outro lado, as restrições para a escolha das interpolações para velocidade e pressão podem ser evitadas através da utilização de métodos estabilizados como os propostos nos trabalhos de HUGHES *et. al.* [28], DE SAMPAIO [29] e ZIENKIEWICZ e WU [30].

HUGHES *et. al.* [28] apresentaram uma formulação de Petrov-Galerkin que evita a necessidade de satisfazer a condição de Babuška-Brezzi para o escoamento de Stokes e permite utilizar interpolação de mesma ordem para todas as variáveis. Ao invés da equação eq. 3-2, o seguinte sistema de equações resulta da formulação proposta por Hughes:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^t - \gamma \mathbf{L} & -\gamma \mathbf{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 - \gamma \mathbf{g} \end{bmatrix}$$

eq. 3-7

Note que a formulação da eq. 3-7 não é simétrica. Além disso ela é baseada em uma interpolação contínua para a pressão. Formulações estabilizadas para aproximações descontínuas da pressão também foram desenvolvidas por KARAM e LOULA [31],[32]. HUGHES e FRANCA [33], posteriormente, desenvolveram uma variante simétrica da formulação da eq. 3-7, que acomoda tanto interpolações contínuas quanto descontínuas para a pressão.

As matrizes \mathbf{L} e \mathbf{M} e o vetor \mathbf{g} resultam de uma aproximação de mínimos quadrados dos balanços de quantidade de movimento no interior de elementos finitos, de forma que a consistência da aproximação não é afetada. Esses termos são combinados com a formulação mista através de uma constante real positiva γ . O método resultante pode ser interpretado com uma formulação do tipo Petrov-Galerkin, onde os termos adicionais servem para aumentar a estabilidade. De fato, a condição de Babuška-Brezzi é evitada no sentido de que não é mais necessária para provar a convergência do método [28].

O fato de que a satisfação da condição dada pela eq. 3-5 não é mais necessária para convergência pode ser verificada manipulando algebricamente o sistema de equações eq. 3-7 . Assim, eliminando os parâmetros de velocidade da eq. 3-7, pode-se escrever:

$$\mathbf{H}^* \mathbf{p} = (\mathbf{C}^t - \gamma \mathbf{L}) \mathbf{B}^{-1} \mathbf{f}_1 + \gamma \mathbf{g} - \mathbf{f}_2$$

eq. 3-8

onde

$$\mathbf{H}^* = (\mathbf{C}^t - \gamma \mathbf{L}) \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C} + \gamma \mathbf{M}$$

eq. 3-9

Note que para $\gamma = 0$, a formulação mista convencional é recuperada. A matriz \mathbf{M} representa um Laplaciano discretizado, responsável pela estabilidade aumentada do método quando $\gamma > 0$. Considerando que pelo menos um valor de pressão seja prescrito, a matriz \mathbf{M} tem posto n_p , independentemente do posto de \mathbf{B}^{-1} . Por outro lado, cabe lembrar que a condição necessária eq. 3-5 vem exatamente do fato de que a matriz \mathbf{H} tem seu posto limitado pelo posto da matriz \mathbf{B}^{-1} . A matriz \mathbf{M} foi chamada de matriz de estabilização na referência [28].

A formulação dada pela eq. 3-7 foi testada para diferentes valores de γ e oscilações de pressão foram observadas quando γ é muito pequeno. De fato, para γ muito pequeno, a contribuição da matriz de estabilização é insuficiente para evitar o mal condicionamento de \mathbf{H}^* quando $\mathbf{H} = \mathbf{C}^t \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C}$ é singular (por exemplo, quando a mesma ordem de interpolação é usada para todas as variáveis).

Em razão do exposto acima, duas são as alternativas possíveis para que métodos que utilizem a pressão (na forma implícita) como variável dependente tenham comportamento estável em regiões de baixo número de Mach. A primeira é utilizar interpolações compatíveis para velocidade e pressão, de acordo com a condição de Babuška-Brezzi. A segunda alternativa é empregar formulações compressíveis que recaiam em formulações estabilizadas para escoamento incompressível, quando o número de Mach tende a zero. Este foi o caminho seguido por ZIENKIEWICZ e CODINA [16] e também adotado neste trabalho.

4 UMA METODOLOGIA PARA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS COMPRESSÍVEIS E/OU QUASE-INCOMPRESSÍVEIS

Neste capítulo é apresentada a nova formulação desenvolvida neste trabalho. Esta formulação usa a técnica de discretização de elementos finitos e foi desenvolvida tanto para escoamentos compressíveis quanto quase-incompressíveis. O método combina variáveis dependentes conservativas e não conservativas. São usadas a velocidade mássica (densidade*velocidade), a energia interna específica e a pressão. A principal característica do método é a derivação de uma equação discretizada para a pressão, onde as contribuições de pressão originárias dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia são tomadas de modo implícito na discretização temporal.

4.1 O Modelo do Meio Contínuo

Apresenta-se o modelo do contínuo usado na nossa descrição do escoamento viscoso compressível com transferência de calor. O problema é definido no domínio aberto Ω , com fronteira Γ , contido no espaço Euclidiano com nde dimensões espaciais. O modelo contínuo é descrito pelas seguintes equações fundamentais.

4.1.1 Equações Fundamentais

Essas equações são escritas usando a convenção de soma para $a = 1, \dots, nde$ e $b = 1, \dots, nde$ da seguinte forma:

Conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial G_a}{\partial x_a} = 0$$

eq. 4-1

Conservação de quantidade de movimento

$$\frac{\partial G_a}{\partial t} + u_b \frac{\partial G_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_b} G_a - \frac{\partial \tau_{ab}}{\partial x_b} + \frac{\partial P}{\partial x_a} - \rho g_a = 0$$

eq. 4-2

Conservação de energia

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_b \frac{\partial e}{\partial x_b} \right) + P \frac{\partial u_b}{\partial x_b} + \frac{\partial q_b}{\partial x_b} - S_{ab} \frac{\partial u_a}{\partial x_b} = 0$$

eq. 4-3

Equações Constitutivas para Tensor Viscoso e Fluxo de Calor

$$S_{ab} = -\frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_c}{\partial x_c} \right) \delta_{ab} + \mu \left(\frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a} \right)$$

eq. 4-4

$$q_b = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_b}$$

eq. 4-5

Equação de Estado Genérica

$$P = z(\rho, e) \rho e$$

eq. 4-6

Nas equações acima G_a , u_a , P e e significam velocidade mássica, velocidade, pressão termodinâmica e energia interna. δ_{ab} é o delta de Kronecker. Note que $\rho, \mu, \kappa, c_p, c_v$ são, respectivamente, a densidade do fluido, viscosidade, condutividade térmica, calor

específico a pressão constante e a volume constante. O campo de gravidade é g_a . Este modelo é completado com a introdução das condições de contorno e condições iniciais dos campos de velocidade mássica, pressão e energia interna.

4.1.2 Usando a Equação de Estado para Eliminar a Densidade

A utilização da equação de estado (eq. 4-6) permite eliminar a densidade do balanço de massa (eq. 4-1), que é rescrita em termos de pressão e energia interna:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_e \frac{\partial P}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial e}\right)_p \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial G_a}{\partial x_a} = 0$$

eq. 4-7

As seguintes propriedades termodinâmicas são definidas

$$\alpha = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_e$$

eq. 4-8

$$\beta = -\left(\frac{\partial \rho}{\partial e}\right)_p$$

eq. 4-9

Substituindo a eq. 4-8 e a eq. 4-9 na equação de balanço de massa (eq. 4-7), tem-se:

$$\alpha \frac{\partial P}{\partial t} - \beta \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial G_a}{\partial x_a} = 0$$

eq. 4-10

Definindo uma nova variável p' através da introdução do potencial da gravidade φ tem-se:

$$\alpha \frac{\partial p'}{\partial t} - \beta \frac{\partial e}{\partial t} + (1 + \alpha \varphi) \frac{\partial G_a}{\partial x_a} = 0$$

eq. 4-11

onde a pressão modificada p' , e o potencial φ são dados por:

$$p' = P + \rho \varphi$$

eq. 4-12

$$\varphi = -\mathbf{g} \cdot \mathbf{x} = -g_h x_h$$

eq. 4-13

4.1.3 Usando a Equação de Continuidade e a Pressão Modificada para Obter uma Outra Forma da Equação de Quantidade de Movimento

Considerando o termo da equação de quantidade de movimento e usando a eq. 4-13

$$\frac{\partial P}{\partial x_a} - \rho g_a = \frac{\partial P}{\partial x_a} + \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x_a} = \left[\frac{\partial P}{\partial x_a} + \frac{\partial (\rho \varphi)}{\partial x_a} \right] - \varphi \frac{\partial \rho}{\partial x_a}$$

eq. 4-14

Usando a eq. 4-12 na eq. 4-14 tem-se:

$$\frac{\partial P}{\partial x_a} - \rho g_a = \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \varphi \frac{\partial \rho}{\partial x_a}$$

eq. 4-15

Escrevendo a densidade em função da pressão e da energia interna, obtém-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_a} = \alpha \frac{\partial P}{\partial x_a} - \beta \frac{\partial e}{\partial x_a}$$

eq. 4-16

Usando a eq. 4-12 na eq. 4-16, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_a} = \alpha \frac{\partial (p' - \rho \varphi)}{\partial x_a} - \beta \frac{\partial e}{\partial x_a} = \alpha \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \alpha \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x_a} - \alpha \varphi \frac{\partial \rho}{\partial x_a} - \beta \frac{\partial e}{\partial x_a}$$

eq. 4-17

Assim,

$$(1 + \alpha \varphi) \frac{\partial \rho}{\partial x_a} = \alpha \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \alpha \rho \frac{\partial \varphi}{\partial x_a} - \beta \frac{\partial e}{\partial x_a}$$

eq. 4-18

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_a} = \frac{\alpha}{(1 + \alpha \varphi)} \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \frac{\alpha}{(1 + \alpha \varphi)} \rho g_a - \frac{\beta}{(1 + \alpha \varphi)} \frac{\partial e}{\partial x_a}$$

eq. 4-19

Substituindo a eq. 4-19 na eq. 4-15, tem-se:

$$\frac{\partial P}{\partial x_a} - \rho g_a = \frac{1}{(1 + \alpha \varphi)} \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \frac{\alpha \varphi}{(1 + \alpha \varphi)} \rho g_a - \frac{\beta \varphi}{(1 + \alpha \varphi)} \frac{\partial e}{\partial x_a}$$

eq. 4-20

Substituindo a eq. 4-20 na eq. 4-2, tem-se para a equação de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial G_a}{\partial t} + u_b \frac{\partial G_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_b} G_a - \frac{\partial S_{ab}}{\partial x_b} + \left(\frac{1}{1 + \alpha \varphi} \right) \frac{\partial p'}{\partial x_a} - \left(\frac{\alpha \varphi}{1 + \alpha \varphi} \right) \rho g_a + \left(\frac{\beta \varphi}{1 + \alpha \varphi} \right) \frac{\partial e}{\partial x_a} = 0$$

eq. 4-21

4.1.4 Obtendo uma Outra Forma da Equação de Energia

A equação de energia também é modificada substituindo-se a eq. 4-12 na eq. 4-3

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_b \frac{\partial e}{\partial x_b} \right) + (p' - \rho \varphi) \frac{\partial u_b}{\partial x_b} + \frac{\partial q_b}{\partial x_b} - S_{ab} \frac{\partial u_a}{\partial x_b} = 0$$

eq. 4-22

Escreve-se uma forma alternativa da equação de energia (eq. 4-3), utilizando a equação de continuidade (eq. 4-1) e a equação de estado (eq. 4-6).

$$\begin{aligned} & [\rho + z e \beta] \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_b \frac{\partial e}{\partial x_b} \right) + \frac{\partial q_b}{\partial x_b} - S_{ab} \frac{\partial u_a}{\partial x_b} = \\ & [z e \alpha] \left[\frac{\partial p'}{\partial t} + \left(\frac{1}{1 + \alpha \varphi} \right) u_b \frac{\partial p'}{\partial x_b} + \left(\frac{1}{1 + \alpha \varphi} \right) G_b g_b + \left(\frac{\beta \varphi}{1 + \alpha \varphi} \right) u_b \frac{\partial e}{\partial x_b} + \varphi \frac{\partial G_b}{\partial x_b} \right] \end{aligned}$$

eq. 4-23

4.1.5 Equações na Forma Adimensional

As seguintes variáveis adimensionais, indicadas pelo sobrescrito ‘*’, relacionam-se com as variáveis originais de acordo com:

$$\begin{array}{llll} u_a = u_0 \dot{u}_a & p' = P_0 + \rho_0 u_0^2 p'^* & T = T_0 (T^* + 1) & G_b = \rho_0 u_0 G_b^* \\ e = e_0 (\dot{e} + 1) & \rho = \rho_0 \dot{\rho} & \varphi = |\mathbf{g}| L \dot{\varphi} & g_a = |\mathbf{g}| g_a^* \\ \mu = \mu_0 \dot{\mu} & \kappa = \kappa_0 \kappa^* & x_a = L x_a^* & t = L t^* / u_0 \\ \alpha = \dot{\alpha} / u_0^2 & \beta = \dot{\beta} \rho_0 / e_0 & & \end{array}$$

eq. 4-24

onde o subscrito '0' indica valores de referência e L é o comprimento de referência.

Em termos das variáveis adimensionais, as equações de balanço tornam-se:

Conservação de Massa

$$\alpha^* \frac{\partial p^*}{\partial t^*} - \beta^* \frac{\partial e^*}{\partial t^*} + \left(1 + \frac{\alpha^* \varphi^*}{Fr^2}\right) \frac{\partial G_a^*}{\partial x_a^*} = 0$$

eq. 4-25

Conservação de Quantidade de Movimento

$$\frac{\partial G_a^*}{\partial t^*} + u_b^* \frac{\partial G_a^*}{\partial x_b^*} + \frac{\partial u_b^*}{\partial x_b^*} G_a^* - \frac{1}{Re} \frac{\partial S_{ab}^*}{\partial x_b^*} + (1 - \Phi_1) \frac{\partial p^*}{\partial x_a^*} - \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^* g_a^* + \Phi_2 \frac{\partial e^*}{\partial x_a^*} = 0$$

eq. 4-26

Conservação de Energia

$$\rho^* \left(\frac{\partial e^*}{\partial t^*} + u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} \right) + \left[z_0 + \gamma Ec p^* - \frac{\gamma Ec}{Fr^2} \rho^* \varphi^* \right] \frac{\partial u_b^*}{\partial x_b^*} + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial q_b^*}{\partial x_b^*} - \frac{\gamma Ec}{Re} S_{ab}^* \frac{\partial u_a^*}{\partial x_b^*} = 0$$

eq. 4-27

ou a equação correspondente a eq. 4-23,

$$\begin{aligned} & \left[\rho^* + \varepsilon \beta^* (e^* + 1) \right] \left(\frac{\partial e^*}{\partial t^*} + u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} \right) + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial q_b^*}{\partial x_b^*} - \frac{\gamma Ec}{Re} S_{ab}^* \frac{\partial u_a^*}{\partial x_b^*} = \\ & \left[\varepsilon \alpha^* (e^* + 1) \right] \left[\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + (1 - \Phi_1) u_b^* \frac{\partial p^*}{\partial x_b^*} + \left(\frac{1 - \Phi_1}{Fr^2} \right) G_b^* g_b^* + \Phi_2 u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} + \frac{\varphi^*}{Fr^2} \frac{\partial G_b^*}{\partial x_b^*} \right] \end{aligned}$$

eq. 4-28

onde

$$\gamma = \frac{T_0 c_p}{e_0}$$

eq. 4-29

$$z_0 = \frac{P_0}{\rho_0 e_0}$$

eq. 4-30

$$\Phi_1 = \frac{\alpha^* \varphi^*}{Fr^2 + \alpha^* \varphi^*}$$

eq. 4-31

$$\Phi_2 = \frac{\beta^* \varphi^*}{Fr^2 + \alpha^* \varphi^*}$$

eq. 4-32

$$S_{ab}^* = -\frac{2}{3} \mu^* \left(\frac{\partial u_c^*}{\partial x_c^*} \right) \delta_{ab} + \mu^* \left(\frac{\partial u_a^*}{\partial x_b^*} + \frac{\partial u_b^*}{\partial x_a^*} \right)$$

eq. 4-33

$$q_b^* = -\kappa^* \frac{\partial T^*}{\partial x_b^*}$$

eq. 4-34

Os números adimensionais de Reynolds, Froude, Prandtl e Eckert são dados por:

$$Re = \frac{\rho_0 u_0 L}{\mu_0} \quad Fr = \frac{u_0}{\sqrt{|g|} L} \quad Pr = \frac{\mu_0 c_p}{\kappa_0} \quad Ec = \frac{u_0^2}{c_p T_0}$$

eq. 4-35

Em aplicações de convecção natural, os dados normalmente incluem uma diferença de temperatura de referência $\Delta\theta$, ao invés de uma velocidade de referência u_0 . No entanto, é uma tarefa simples definir a velocidade de referência usando-se para isso a diferença de temperatura dada e o coeficiente de expansão térmica volumétrico β_v . Na realidade, se a velocidade de referência u_0 for escolhida como $u_0 = (\beta_v \Delta\theta |g| L)^{1/2}$, então o número de Reynolds ao quadrado torna-se o número de Grashof $Gr = Re^2 = \rho_0^2 |g| \beta_v \Delta\theta L^3 / \mu_0^2$, que é o número adimensional usualmente empregado para parametrizar problemas de convecção natural.

No restante deste trabalho, serão empregadas as equações adimensionalizadas. Assim o sobrescrito '*' usado para indicar as quantidades adimensionais será abandonado. Além disso, a variável p' será denotada por p .

4.2 Esquemas de Discretização e Solução

Elementos finitos Lagrangianos lineares são empregados para representar os campos de velocidade mássica, pressão e energia interna. O método de Galerkin é usado para a obtenção da equação discretizada para a pressão, enquanto que uma aproximação de Petrov-Galerkin, baseada em mínimos quadrados, é usada para a derivação das equações discretizadas para a velocidade mássica e energia interna.

O problema é resolvido usando um esquema segregado de solução. Primeiramente encontra-se o campo de pressão e depois os campos de velocidade mássica e energia interna, respectivamente. O esquema cíclico de atualização da pressão, velocidade mássica e energia interna requer a solução de sistemas simétricos de equações. Estes sistemas são resolvidos utilizando o método de gradientes conjugados com pré-condicionamento, apropriados para cálculo paralelo/vetorial em supercomputadores [34].

4.2.1 Equação para a Pressão

Considere a seguinte discretização temporal para a equação de balanço de massa (eq. 4-25),

$$\alpha'' \left(\frac{p^{n+1} - p''}{\Delta t} \right) - \frac{\beta''}{\rho^{n+1/2}} \left[\rho^{n+1/2} \left(\frac{e^{n+1} - e'}{\Delta t} \right) \right] + \frac{\partial G_a^{n+1}}{\partial x_a} = \frac{\beta''}{\rho^{n+1/2}} \left[\rho^{n+1/2} \left(\frac{e' - e''}{\Delta t} \right) \right] - \frac{\alpha'' \varphi}{Fr^2} \frac{\partial G_a''}{\partial x_a}$$

eq. 4-36

e a seguinte discretização temporal em passos fracionados do balanço de energia (eq. 4-27),

$$\rho^{n+1/2} \left(\frac{e' - e''}{\Delta t} + \theta_1 u_b'' \frac{\partial e'}{\partial x_b} + \theta_2 u_b'' \frac{\partial e''}{\partial x_b} \right) + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial q_b''}{\partial x_b} - \frac{\gamma Ec}{Re} S_{ub}'' \frac{\partial u_a''}{\partial x_b} = 0$$

eq. 4-37

$$\rho^{n+1/2} \left(\frac{e^{n+1} - e'}{\Delta t} \right) + \left(z_0 + \gamma Ec p^{n+1} - \frac{\gamma Ec}{Fr^2} \rho^{n+1/2} \varphi \right) \frac{\partial u_b''}{\partial x_b} = 0$$

eq. 4-38

Nas equações acima, os subscritos n e $n+1$ denotam o nível de tempo e Δt é o passo de tempo. Aqui os parâmetros θ_1 e $\theta_2 = 1 - \theta_1$ controlam quão implícita é a discretização temporal do termo convectivo (explícito para $\theta_1 = 0$ e implícito para $\theta_1 = 1$). Neste trabalho será empregado $\theta_1 = 0,5$, a não ser que seja mencionado outro valor.

Os campos de velocidade mássica, pressão e energia interna no nível de tempo k são interpolados como $\hat{G}_a^k = N_j G_{aj}^k$, $\hat{p}^k = N_j p_j^k$ e $\hat{e}^k = N_j e_j^k$, respectivamente, onde N_j representa funções de forma Lagrangianas lineares e G_{aj}^k , p_j^k e e_j^k são os valores nodais correspondentes no nível de tempo k .

Note que quando o balanço de energia foi dividido na eq. 4-37 e na eq. 4-38, o termo que representa a contribuição compressível foi isolado na eq. 4-38. Assim, a eq. 4-37 manteve os demais termos, típicos de aplicações incompressíveis.

Da eq. 4-36 e da eq. 4-38, obtém-se

$$\begin{aligned} \alpha'' \left(\frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} \right) + \frac{\beta''}{\rho^{n+1/2}} \left[z_0 + \gamma Ec p^{n+1} - \frac{\gamma Ec}{Fr^2} \rho^{n+1/2} \varphi \right] \frac{\partial u_a''}{\partial x_a} + \frac{\partial G_a^{n+1}}{\partial x_a} = \\ \frac{\beta''}{\rho^{n+1/2}} \left[\rho^{n+1/2} \left(\frac{e' - e''}{\Delta t} \right) \right] - \frac{\alpha'' \varphi}{Fr^2} \frac{\partial G_a''}{\partial x_a} \end{aligned}$$

eq. 4-39

Usando o método de Galerkin, obtém-se a seguinte aproximação de resíduos ponderados,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\alpha''}{\Delta t} + \frac{\gamma Ec \beta''}{\rho^{n+1/2}} \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{p}^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = \int_{\Omega} N_i \frac{\alpha''}{\Delta t} \hat{p}'' d\Omega + \int_{\Omega} N_i \frac{\beta''}{\Delta t} (\hat{e}' - \hat{e}'') d\Omega + \\ \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\gamma Ec}{Fr^2} \varphi - \frac{z_0}{\rho^{n+1/2}} \right) \beta'' \frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\alpha'' \varphi}{Fr^2} N_i \frac{\partial \hat{G}_a''}{\partial x_a} d\Omega \quad \forall p_i^{n+1} \text{ livre} \end{aligned}$$

eq. 4-40

Na equação acima, as funções peso N_i são as funções de forma associadas as variáveis de pressão nodais livres p_i^{n+1} . A densidade $\rho^{n+1/2}$ é obtida usando-se uma expansão em série de Taylor a partir do nível de tempo n e do balanço de massa,

$$\rho^{n+1/2} = \rho^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \rho''}{\partial t} = \rho^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \hat{G}_a''}{\partial x_a}$$

eq. 4-41

ρ'' , α'' e β'' são avaliados como constantes dentro de cada elemento (eles são obtidos da energia interna e pressão definidos no baricentro do elemento).

Retornando-se à eq. 4-40, integra-se por partes o divergente da velocidade mássica,

$$\int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{G}_a^{n+1} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i \hat{G}_a^{n+1} n_a d\Gamma$$

eq. 4-42

onde n_a denota o vetor normal apontado para fora da fronteira Γ .

Usando uma série de Taylor no tempo e aproximando a equação de balanço de quantidade de movimento (eq. 4-26), a equação acima torna-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega &= - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left(\hat{G}_a^n + \Delta t \frac{\partial \hat{G}_a^{n+\theta}}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\Gamma} N_i \hat{G}_a^{n+1} n_a d\Gamma = \\ \int_{\Omega} \Delta t \frac{\partial N_i}{\partial x_a} &\left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_b} \hat{G}_a^n - \frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}^n}{\partial x_b} + (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} - \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} g_a + \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_a} \right) d\Omega \\ &- \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{G}_a^n d\Omega + \int_{\Gamma} N_i \hat{G}_a^{n+1} n_a d\Gamma \end{aligned}$$

eq. 4-43

Note que o termo de gradiente de pressão, que aparece da equação de balanço de quantidade de movimento, é aproximado por uma discretização temporal totalmente implícita.

Integrando por partes novamente,

$$\int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_a} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i (\hat{G}_a^{n+1} - \hat{G}_a^n) n_a d\Gamma +$$

$$\int_{\Omega} \Delta t \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_b} \hat{G}_a^n - \frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}^n}{\partial x_b} + (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} - \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} g_a + \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_a} \right) d\Omega$$

eq. 4-44

As seguintes condições de contorno para pressão e fluxo de massa são prescritas em Γ_p e Γ_G , tais que $\Gamma_p \cup \Gamma_G = \Gamma$ e $\Gamma_p \cap \Gamma_G = \emptyset$:

$$p = \bar{p} \quad em \quad \Gamma_p$$

eq. 4-45

$$G_a n_a = \bar{G} \quad em \quad \Gamma_G$$

eq. 4-46

É importante lembrar que as funções peso N_i são associadas aos valores nodais de pressão livres e desaparecem na parte do contorno Γ_p , onde a pressão é prescrita. Logo, considerando as condições de contorno acima, a eq. 4-44 torna-se:

$$\int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_a} d\Omega + \int_{\Gamma_G} N_i (\bar{G}^{n+1} - \bar{G}^n) d\Gamma +$$

$$\int_{\Omega} \Delta t \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left(\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_b} \hat{G}_a^n - \frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}^n}{\partial x_b} + (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} - \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} g_a + \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_a} \right) d\Omega$$

eq. 4-47

O termo do contorno na equação acima desaparece se o fluxo de massa em Γ_G não varia com o tempo. Em particular, este termo desaparece em paredes sólidas ou quando soluções estacionárias são procuradas.

Introduzindo a eq. 4-47 de volta na equação de pressão eq. 4-40, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\alpha''}{\Delta t} + \frac{\gamma Ec \beta''}{\rho^{n+1/2}} \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{p}^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} \Delta t (1 - \Phi_1) \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = \\
& \int_{\Omega} N_i \frac{\alpha''}{\Delta t} \hat{p}'' d\Omega + \int_{\Omega} N_i \frac{\beta''}{\Delta t} (\hat{e}' - \hat{e}'') d\Omega + \int_{\Omega} \Delta t \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} g_a d\Omega \\
& - \int_{\Omega} \Delta t \Phi_2 \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \Delta t \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left(\hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{G}_a''}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b''}{\partial x_b} \hat{G}_a'' \right) d\Omega \\
& + \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\gamma Ec}{Fr^2} \varphi + \frac{z_0}{\rho^{n+1/2}} \right) \beta'' \frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\alpha'' \varphi}{Fr^2} N_i \frac{\partial \hat{G}_a''}{\partial x_a} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a''}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Gamma_g} N_i (\bar{G}^{n+1} - \bar{G}'') d\Gamma \quad \forall p_i^{n+1} \text{ livre}
\end{aligned}$$

eq. 4-48

A equação de pressão (eq. 4-48) envolve termos de pressão provenientes das equações de massa, quantidade de movimento e energia (parte compressível). O mais importante é notar que os termos de pressão são aproximados usando uma discretização temporal totalmente implícita. Isto permite manter a estabilidade na solução da pressão, apesar de das curtas escalas de tempo associadas às rápidas ondas de pressão terem sido ignoradas. Além disso, note a presença do termo $\int_{\Omega} \Delta t (1 - \Phi_1) \nabla N_i \cdot \nabla \hat{p}^{n+1} d\Omega$, que corresponde à contribuição da matriz de estabilização **M** discutida no capítulo 3.

É importante notar que antes da solução da eq. 4-48, o campo de energia interna \hat{e}' , correspondente a solução da eq. 4-37, deve ser determinado. Esta etapa, que pode ser vista como um pré-processamento para a atualização da pressão, é descrita a seguir.

O residuo local da parte incompressível da equação de energia (eq. 4-37) é escrito como

$$\hat{r}_e = \hat{p}^{n+1/2} \left(\frac{\hat{e}' - \hat{e}''}{\Delta t} + \theta_1 \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}'}{\partial x_b} + \theta_2 \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} \right) + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial \hat{q}_b''}{\partial x_b} - \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}'' \frac{\partial u_a''}{\partial x_b}$$

eq. 4-49

onde $\hat{e}' = N_i e'_i$.

A soma dos resíduos quadrados no domínio é dada por

$$S = \int_{\Omega} \lambda \hat{r}_e \hat{r}_e d\Omega$$

eq. 4-50

Por enquanto, não é especificada nenhuma discretização espacial particular para \hat{q}_b e \hat{S}_{ab} e as contribuições viscosas e de fluxo de calor são tratadas como termos fontes no nível de tempo n .

Minimizando os resíduos quadrados S em relação aos valores nodais livres e'_i e escolhendo $\lambda = \Delta t / \hat{\rho}^{n+1/2}$, obtém-se a seguinte formulação de resíduos ponderados,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\hat{\rho}^{n+1/2}}{\Delta t} \left(\hat{e}' - \hat{e}'' + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}'}{\partial x_b} + \theta_2 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} \right) d\Omega + \\ \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left(\frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial \hat{q}_b''}{\partial x_b} - \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}'' \frac{\partial u_a''}{\partial x_b} \right) d\Omega = 0 \end{aligned}$$

$\forall e'_i \text{ livre}$

eq. 4-51

Note que a função peso na eq. 4-51 tem a mesma estrutura da função peso do método *SUPG* [35], mas depende do passo de tempo e do *grau de implicidade* θ_1 usado. Para $\theta_1 = 0.5$, uma quantidade apropriada de *streamline upwinding* é introduzida se o passo de tempo for ajustado de acordo com o chamado parâmetro de *upwind* ótimo [35].

Condições de contorno de energia interna e fluxo de calor são prescritas nas partições da fronteira Γ_e e Γ_q , tais que $\Gamma_e \cup \Gamma_q = \Gamma$ e $\Gamma_e \cap \Gamma_q = \emptyset$, como

$$e = \bar{e} \quad \text{em } \Gamma_e$$

eq. 4-52

$$q_b n_b = \bar{q} \quad \text{em } \Gamma_q$$

eq. 4-53

Integrando por partes o divergente do fluxo calor na eq. 4-51 e considerando as condições de contorno acima, obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\hat{\rho}^{n+1/2}}{\Delta t} \left(\hat{e}' + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}'}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\hat{\rho}^{n+1/2}}{\Delta t} \left(\hat{e}'' - \theta_2 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} \right) d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}'' \frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_b} d\Omega + \int_{\Omega} \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{q}_b'' d\Omega + \\ & - \int_{\Gamma_q} \frac{\gamma}{Re Pr} N_i \bar{q} d\Gamma - \int_{\Omega} \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial \hat{q}_b''}{\partial x_b} d\Omega \quad \forall e' \text{ livre} \end{aligned}$$

eq. 4-54

Neste ponto é preciso introduzir a discretização espacial dos termos viscosos e de fluxo de calor na eq. 4-54. Com base na eq. 4-33 e eq. 4-34, essas quantidades podem ser expressas em termos dos campos discretizados de velocidade e temperatura como

$$\hat{S}_{ab}'' = -\frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) \delta_{ab} + \mu \left(\frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_a} \right)$$

eq. 4-55

$$\hat{q}_b'' = -\kappa \frac{\partial \hat{T}''}{\partial x_b}$$

eq. 4-56

onde $\hat{u}_a'' = N_j u_{a,j}''$ e $\hat{T}'' = N_j T_j''$ são interpolados usando as funções de forma Lagrangianas lineares N_j e os valores nodais de velocidade são dados por,

$$u_{a,j}'' = \frac{G_{a,j}''}{\rho_j''}$$

eq. 4-57

Na eq. 4-57, ρ_j'' e T_j'' e significam os valores nodais de densidade e temperatura, respectivamente. Eles são obtidos da equação de estado do fluido, usando-se os valores nodais correspondentes para energia interna e pressão.

É importante notar que com as aproximações acima para tensão viscosa e fluxo de calor, a equivalência entre a eq. 4-54 e o método dos mínimos quadrados é perdida. Isto é devido a existência, nas equações eq. 4-49 e eq. 4-50 de derivadas de segunda ordem de temperatura (energia interna), que podem ser representadas no interior dos elementos finitos, mas não através das interfaces dos elementos. Na formulação adotada aqui, as contribuições de fluxo de calor para a eq. 4-54 são avaliadas no interior dos elementos, seguindo um procedimento usualmente adotado nas formulações de Petrov-Galerkin [36]

Note que a implementação do método dos mínimos quadrados requer a reformulação do problema em termos de equações diferenciais de primeira ordem, com a introdução de novas variáveis dependentes, ou o emprego de funções de forma com continuidade C_1 . Apesar do método de mínimos quadrados e da presente formulação de Petrov-Galerkin não mais serem equivalentes, o esquema de Petrov-Galerkin herda do método dos mínimos quadrados as importantes propriedades de simetria e de ser positivo definido, enquanto mantém o uso de funções de forma simples. Deve-se ressaltar também que a presente formulação introduz automaticamente *streamline upwinding* [35], uma característica muito importante quando se trata da simulação de escoamentos fortemente convectivos.

Após a energia interna \hat{e}' ter sido determinada, a equação fortemente implícita para a pressão (eq. 4-48) pode ser resolvida para \hat{p}^{n+1} . O próximo passo é a solução da nova velocidade mássica \hat{G}_a^{n+1} e da nova energia interna \hat{e}^{n+1} . Mais uma vez, a formulação de resíduos ponderados de Petrov-Galerkin é empregada na discretização, como descrito na próxima seção.

4.2.2 Atualização da Velocidade Mássica

A formulação de resíduos ponderados usada para a atualização da velocidade mássica é obtida usando-se o mesmo raciocínio empregado na seção anterior, quando da derivação da aproximação de Petrov-Galerkin da eq. 4-37. Aqui, o resíduo local da equação de quantidade de movimento eq. 4-26 é

$$\begin{aligned} \hat{r}_a = & \frac{\hat{G}_a^{n+1} - \hat{G}_a^n}{\Delta t} + \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{G}_a^{n+\theta_1}}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_b} \hat{G}_a^{n+\theta_1} - \frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}^n}{\partial x_b} + (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} + \\ & - \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} g_a + \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_a} \end{aligned}$$

eq. 4-58

onde $\hat{G}_a^{n+\theta_1} = \theta_1 \hat{G}_a^{n+1} + \theta_2 \hat{G}_a^n$.

A soma dos resíduos quadrados no domínio é dada por

$$S = \int_{\Omega} \lambda \hat{r}_a \hat{r}_a d\Omega$$

eq. 4-59

Minimizando os resíduos quadrados em relação aos graus de liberdade da velocidade mássica G_a^{n+1} e escolhendo $\lambda = \Delta t$, obtém-se a seguinte formulação de resíduos ponderados

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \frac{1}{\Delta t} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{G}_a^{n+1} + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega \\ & \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \frac{1}{\Delta t} \left[\left(1 - \theta_2 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{G}_a^n - \theta_2 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_b} \right] d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \left[\frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}''}{\partial x_b} - (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} + \frac{\Phi_1}{Fr^2} \hat{\rho}^{n+1/2} g_a - \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_a} \right] \\ & \qquad \qquad \qquad \forall G_{aj}^{n+1} \text{ livre} \end{aligned}$$

eq. 4-60

Condições de contorno para velocidade mássica e tração são prescritas nas partições da fronteira Γ_{Ga} e Γ_{Ia} , tais que $\Gamma_{Ga} \cup \Gamma_{Ia} = \Gamma$ e $\Gamma_{Ga} \cap \Gamma_{Ia} = \emptyset$, da seguinte forma

$$G_a = \bar{G}_a \quad \text{em } \Gamma_{Ga}$$

eq. 4-61

$$\left(-p \delta_{ab} + \frac{1}{Re} S_{ab} \right) n_b = \bar{T}_a \quad \text{em } \Gamma_{Ia}$$

eq. 4-62

onde δ_{ab} é o delta de Kronecker. Usando a identidade de Green na eq. 4-60, e considerando as condições de contorno acima, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \frac{1}{\Delta t} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{G}_a^{n+1} + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega = \\
& \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \frac{1}{\Delta t} \left[\left(1 - \theta_2 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_b''}{\partial x_b} \right) \hat{G}_a^{n+1} - \theta_2 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{G}_a^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega + \\
& \int_{\Gamma_a} N_i \bar{T}_a d\Gamma + \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \hat{p}^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} \Phi_1 N_i \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{1}{Re} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{S}_{ab}'' d\Omega + \\
& \int_{\Omega} \theta_1 \Delta t \left[\frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} N_i + \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \left[\frac{1}{Re} \frac{\partial \hat{S}_{ab}''}{\partial x_b} - (1 - \Phi_1) \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} \right] d\Omega + \\
& \int_{\Omega} \left[\left(1 + \theta_1 \Delta t \frac{\partial \hat{u}_c''}{\partial x_c} \right) N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right] \left[\frac{\Phi_1}{Fr^2} \hat{\rho}^{n+1/2} g_a - \Phi_2 \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_a} \right] d\Omega \\
& \qquad \qquad \qquad \forall G_{ai}^{n+1} \text{ livre}
\end{aligned}$$

eq. 4-63

A equação acima é resolvida para cada componente de velocidade mássica (\hat{G}_a^{n+1} , para $a=1, nde$), imediatamente após a determinação do campo de pressão.

4.2.3 Atualização da Energia Interna

Na seção 4.2.1, considerou-se o balanço de energia na forma da eq. 4-27 ao invés da forma mostrada na eq. 4-28. Isto permitiu a inclusão da contribuição compressível para o balanço de energia (eq. 4-27) na equação para a pressão, como indicado pelas equações (eq. 4-36) e (eq. 4-39). No entanto, para atualização do campo de energia interna, utiliza-se o balanço de energia na forma da eq. 4-28, que permite a utilização direta da velocidade mássica \mathbf{G}^{n+1} recém calculada.

A aproximação de Petrov-Galerkin baseada no método de mínimos quadrados é também usada para a obtenção do esquema de atualização da energia interna. Aqui o resíduo local da equação de energia eq. 4-28 é dado por:

$$\begin{aligned} \hat{r}_e = & \left[\hat{\rho}^{n+1/2} + z \beta (\hat{e}'' + 1) \right] \left(\frac{\hat{e}^{n+1} - \hat{e}''}{\Delta t} + \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}^{n+1}}{\partial x_b} \right) + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial \hat{q}_b''}{\partial x_b} - \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}'' \frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_b} + \\ & - \left[z \alpha (\hat{e}'' + 1) \right] \left[\frac{\hat{p}^{n+1} - \hat{p}''}{\Delta t} + (1 - \Phi_1) \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_b} + \left(\frac{1 - \Phi_1}{Fr^2} \right) \hat{G}_b^{n+1} g_b + \Phi_2 \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} + \frac{\varphi}{Fr^2} \frac{\partial \hat{G}_b^{n+1}}{\partial x_b} \right] \end{aligned}$$

eq. 4-64

e a soma dos resíduos quadrados no domínio é dada por

$$S = \int_{\Omega} \lambda \hat{r}_e \hat{r}_e d\Omega$$

eq. 4-65

Minimizando os resíduos quadrados S em relação aos valores nodais livres de e_i^{n+1} e considerando as condições de contorno dadas pela eq. 4-52 e eq. 4-53, obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\left[\hat{\rho}^{n+1/2} + z \beta (\hat{e}'' + 1) \right] \left(\hat{e}^{n+1} + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}^{n+1}}{\partial x_b} \right)}{\Delta t} d\Omega = \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\left[\hat{\rho}^{n+1/2} + z \beta (\hat{e}'' + 1) \right] \left(\hat{e}'' - \theta_2 \Delta t \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} \right)}{\Delta t} d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{q}_b'' d\Omega - \int_{\Gamma_q} \frac{\gamma}{Re Pr} N_i \bar{q} d\Gamma + \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}'' \frac{\partial \hat{u}_a''}{\partial x_b} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\gamma}{Re Pr} \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{q}_b''}{\partial x_b} d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left[z \alpha (\hat{e}'' + 1) \right] \left[\frac{\hat{p}^{n+1} - \hat{p}''}{\Delta t} + (1 - \Phi_1) \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c'' \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \left[z \alpha (\hat{e}'' + 1) \right] \left[\left(\frac{1 - \Phi_1}{Fr^2} \right) \hat{G}_b^{n+1} g_b + \Phi_2 \hat{u}_b'' \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_b} + \frac{\varphi}{Fr^2} \frac{\partial \hat{G}_b^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega \\ & \quad \forall e_i^{n+1} \text{ livre} \end{aligned}$$

eq. 4-66

4.3 Particularização para Gás Perfeito

4.3.1 Equações de Estado para Gás Perfeito

Em particular, para gás perfeito, as equações de estado são

$$P = (\gamma - 1)\rho e$$

eq. 4-67

e

$$e = c_v T$$

eq. 4-68

onde

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}$$

eq. 4-69

Assim, substituindo a eq. 4-67 na equação de estado genérica usada neste trabalho (eq. 4-6) tem-se

$$z = \gamma - 1$$

eq. 4-70

Usando a eq. 4-67, as propriedades termodinâmicas α e β podem ser escritas como

$$\alpha = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_e = \frac{1}{(\gamma - 1) e} = \frac{\rho}{P}$$

eq. 4-71

$$\beta = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial e} \right)_P = \frac{P}{(\gamma - 1) e^2} = \frac{\rho}{e}$$

eq. 4-72

4.3.2 Formas Adimensionais da Equação de Estado e do Balanço de Energia

$$\rho^* \left(\frac{\partial e^*}{\partial t^*} + u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} \right) + \left[(\gamma - 1) + \gamma Ec p^* - \frac{\gamma Ec}{Fr^2} \rho^* \varphi^* \right] \frac{\partial u_b^*}{\partial x_b^*} + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial q_b^*}{\partial x_b^*} - \frac{\gamma Ec}{Re} S_{ab}^* \frac{\partial u_a^*}{\partial x_b^*} = 0$$

eq. 4-73

e

$$\begin{aligned} & \left[\gamma \rho^* \right] \left(\frac{\partial e^*}{\partial t^*} + u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} \right) + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial q_b^*}{\partial x_b^*} - \frac{\gamma Ec}{Re} S_{ab}^* \frac{\partial u_a^*}{\partial x_b^*} = \\ & \left[\gamma Ec \right] \left[\frac{\partial p^*}{\partial t^*} + (1 - \Phi_1) u_b^* \frac{\partial p^*}{\partial x_b^*} + \left(\frac{1 - \Phi_1}{Fr^2} \right) G_b^* g_b^* + \Phi_2 u_b^* \frac{\partial e^*}{\partial x_b^*} + \frac{\varphi^*}{Fr^2} \frac{\partial G_b^*}{\partial x_b^*} \right] \end{aligned}$$

eq. 4-74

onde

$$\rho^* = \frac{[\gamma - 1 + \gamma Ec p^*]}{\left[(\gamma - 1)(e^* + 1) + \frac{\gamma Ec}{Fr^2} \varphi^* \right]}$$

eq. 4-75

e

$$e^* = T^*$$

eq. 4-76

Observação:

Em aplicações de engenharia aeronáutica, os problemas normalmente são parametrizados usando-se o número de Mach (M), ao invés do número de Eckert (Ec). Para gás perfeito, a relação entre esses grupos adimensionais é

$$Ec = (\gamma - 1) M^2$$

eq. 4-77

4.3.3 Particularização das Equações Discretizadas para Pressão e Energia Interna

A equação discretizada para a pressão \hat{p}^{n+1} (eq. 4-48) torna-se

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\alpha^n}{\Delta t} + \frac{\gamma Ec \beta^n}{\rho^{n+1/2}} \frac{\partial \hat{u}_h^n}{\partial x_b} \right) \hat{p}^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} \Delta t (1 - \Phi_1) \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_a} d\Omega = \\ \int_{\Omega} N_i \frac{\alpha^n}{\Delta t} \hat{p}^n d\Omega + \int_{\Omega} N_i \frac{\beta^n}{\Delta t} (\hat{e}' - \hat{e}^n) d\Omega + \int_{\Omega} \Delta t \frac{\Phi_1}{Fr^2} \rho^{n+1/2} \frac{\partial N_i}{\partial x_a} g_a d\Omega \\ - \int_{\Omega} \Delta t \Phi_2 \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \Delta t \frac{\partial N_i}{\partial x_a} \left(\hat{u}_h^n \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial u_h^n}{\partial x_b} \hat{G}_a^n \right) d\Omega \\ + \int_{\Omega} N_i \left(\frac{\gamma Ec}{Fr^2} \varphi + \frac{1 - \gamma}{\rho^{n+1/2}} \right) \beta^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\alpha^n \varphi}{Fr^2} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_a} d\Omega \\ - \int_{\Omega} N_i \frac{\partial \hat{G}_a^n}{\partial x_a} d\Omega - \int_{\Gamma_G} N_i (\bar{G}^{n+1} - \bar{G}^n) d\Gamma \quad \forall \text{ free } p_i^{n+1} \end{aligned}$$

eq. 4-78

A equação discretizada para a energia interna \hat{e}^{n+1} (eq. 4-66) torna-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \gamma \frac{\hat{p}^{n+1/2}}{\Delta t} \left(\hat{e}^{n+1} + \theta_1 \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{e}^{n+1}}{\partial x_b} \right) d\Omega = \\
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \gamma \frac{\hat{p}^{n+1/2}}{\Delta t} \left(\hat{e}^n - \theta_2 \Delta t \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_b} \right) d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial N_i}{\partial x_b} \hat{q}_b^n d\Omega - \int_{\Gamma_q} \frac{\gamma}{Re Pr} N_i \bar{q} d\Gamma + \\
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \frac{\gamma Ec}{Re} \hat{S}_{ab}^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\gamma}{Re Pr} \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \frac{\partial \hat{q}_b^n}{\partial x_b} d\Omega + \\
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \gamma Ec \left[\frac{\hat{p}^{n+1} - \hat{p}^n}{\Delta t} + (1 - \Phi_1) \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{p}^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega + \\
& \int_{\Omega} \left(N_i + \theta_1 \Delta t \hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \right) \gamma Ec \left[\left(\frac{1 - \Phi_1}{Fr^2} \right) \hat{G}_b^{n+1} g_b + \Phi_2 \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{e}^n}{\partial x_b} + \frac{\varphi}{Fr^2} \frac{\partial \hat{G}_b^{n+1}}{\partial x_b} \right] d\Omega \\
& \quad \forall \text{ free } e_i^{n+1}
\end{aligned}$$

eq. 4-79

4.4 Passo de Tempo Local

A escolha do passo de tempo é de fundamental importância para a precisão e estabilidade do método. Note que os pesos de Petrov-Galerkin, e os termos de estabilização associados, são parametrizados pelo passo de tempo. Os termos de estabilização também podem ser interpretados como dissipação artificial. Aqui, no entanto, estes termos aparecem naturalmente da derivação, ao invés de serem adicionados *a posteriori*.

Para elementos lineares, uma quantidade apropriada de *streamline upwinding* é introduzida no balanço de quantidade de movimento quando o passo de tempo é escolhido como

$$\Delta t = \left[\coth \left(\frac{C_{Re}}{2} \right) - \frac{2}{C_{Re}} \right] \frac{h_e}{\|\mathbf{u}^n\|}$$

eq. 4-80

onde $\|\mathbf{u}''\|$ é o módulo de velocidade e h_e é o tamanho característico do elemento (a raiz quadrada da área do elemento). O número de Reynolds do elemento C_{Re} e o número de Reynolds do problema Re são relacionados da seguinte forma,

$$C_{Re} = \frac{\rho \|\mathbf{u}''\| h_e}{\mu} Re$$

eq. 4-81

É importante lembrar que as variáveis e as equações que governam o problema estão na forma adimensional. Assim, o passo de tempo, velocidade, propriedades físicas e tamanho do elemento nas equações (eq. 4-80) e (eq. 4-81) são quantidades adimensionais. Os valores dimensionais correspondentes podem ser prontamente obtidos usando-se as escalas de referência para comprimento (L), velocidade (u_0), densidade (ρ_0), viscosidade (μ_0) e tempo (L / u_0).

A escolha do passo de tempo acima é apropriada para seguir a evolução no tempo dos processos de convecção-difusão de quantidade de movimento que podem ser resolvidos em uma malha de tamanho h_e , como discutido por DE SAMPAIO *et. al.* [37].

Para o limite de convecção pura, isto é $C_{Re} \rightarrow \infty$, a eq. 4-80 torna-se,

$$\Delta t = \frac{h_e}{\|\mathbf{u}''\|}$$

eq. 4-82

enquanto que para difusão pura ($C_{Re} = 0$), a eq. 4-80 fornece,

$$\Delta t = \frac{1}{6} \frac{\rho h_e^2}{\mu} Re$$

eq. 4-83

Por outro lado, para introduzir *upwinding* ótimo na equação de energia, é preciso substituir o número de Reynolds do elemento na eq. 4-80 pelo número de Peclet do elemento dado por

$$C_{pe} = \frac{\rho \| \mathbf{u}'' \| h_e}{\kappa} Re Pr$$

eq. 4-84

Claro que as escalas de tempo das equações de quantidade de movimento e de energia podem diferir. Além disso, note que a escala de tempo dada pela eq. 4-80 varia espacialmente de acordo com os valores locais de velocidade, propriedades físicas e tamanho da malha. Assim, para introduzir *upwinding* ótimo tanto no balanço de quantidade de movimento quanto no balanço de energia, é necessário considerar duas distribuições espaciais distintas de passo de tempo.

Emprega-se aqui um algoritmo que permite que cada grau de liberdade avance no tempo de acordo com seu próprio passo de tempo local [38]. O algoritmo começa com todos os graus de liberdade ativos e com as variáveis definidas no tempo t'' . Depois continua da seguinte forma:

- a) Calcule os passos de tempo dos elementos para velocidade mássica usando os valores de C_{Re} e os passos de tempo dos elementos para energia interna e pressão usando os valores de C_{pe} .
- b) Projete os valores dos passos de tempo dos elementos para os nós da malha, obtendo distribuições nodais do passo de tempo para \hat{G}_a , \hat{p} e \hat{e} .
- c) Escolha um passo de tempo de interpolação Δt_{int} entre as escalas de tempo mínima (Δt_{min}) e máxima (Δt_{max}).
- d) Defina o nível de tempo de interpolação $t_{int} = t'' + \Delta t_{int}$.
- e) Resolva seqüencialmente a eq. 4-54, eq. 4-48, eq. 4-63 e eq. 4-66 para os graus de liberdade ativos usando as respectivas distribuições nodais de passo de tempo.

f) Interpole, no domínio do tempo, os graus de liberdade cujo tempo excedeu t_{int} e congele seus valores interpolados no tempo t_{int} . Estes graus de liberdade são temporariamente removidos da lista de variáveis ativas e tratados como *pseudo* condições de contorno para o problema definido em termos das variáveis ativas remanescentes.

g) Ainda existem variáveis ativas?

Caso sim

g1) Recalcule os passos de tempo locais para as variáveis ativas remanescentes e retorne para o passo e.

Caso contrário

g2) Escreva em arquivo de saída a solução no tempo t_{int} .

g3) Libere os graus de liberdade inativos (congelados).

g4) Redefina $t'' = t_{int}$ e retorne para o passo a.

Fim

O processo continua até que todo o intervalo de tempo requerido pela análise tenha sido abrangido. Note que os graus de liberdade associados com passos de tempo grandes são atualizados menos freqüentemente que aqueles associados com passos de tempo menores, reduzindo o esforço computacional. O algoritmo descrito acima conduz a um método adaptativo para a função peso, onde o passo de tempo local é ajustado de acordo com a velocidade local, as propriedades físicas e o tamanho da malha., buscando otimizar a aproximação em uma dada malha.

4.4.1 Desprezando a Escala de Tempo de Pressão em Escoamentos Quase Incompressíveis

As escalas de tempo associadas a transientes de pressão não foram consideradas quando os passos de tempo locais foram definidos. De fato, estamos apenas interessados nas escalas de tempo de transferência de quantidade de movimento e de energia que ocorrem nos processos de convecção-difusão. No entanto, a medida que chega-se ao limite incompressível ($M \ll 1$), as ondas de pressão propagam-se a uma velocidade muito maior do que a do próprio escoamento. Neste caso, os transientes de pressão são

muito mais rápidos do que é possível resolver com os passos de tempo utilizados. Assim, a estabilidade dependerá da habilidade do algoritmo em suavizar os erros de pressão correspondentes.

Para esquemas que aproximam a pressão explicitamente, ignorar as escalas de pressão leva a instabilidade. No entanto, este não é o caso para o presente método, onde os termos de pressão na equação de pressão (eq. 4-48) são aproximados utilizando uma discretização temporal totalmente implícita e a matriz de estabilização para pressão discutida no capítulo 3 está presente. Isto permite manter a estabilidade apesar das curtas escalas de tempo associadas às rápidas ondas de pressão não terem sido consideradas na escolha do passo de tempo.

4.5 Remalhagem Adaptativa

Um esquema de remalhagem diz respeito apenas a discretização espacial. No entanto, quando se está lidando com problemas transientes, o erro total da solução está associado não apenas com a discretização espacial, mas também com a integração no tempo das equações que governam o problema. Assim, alguma forma de adaptação do passo temporal é necessária no que tange à análise de problemas transientes.

Neste trabalho, o estimador de erro *a posteriori* proposto por ZIENKIEWICZ e ZHU [39] é usado para estimar o erro do gradiente de velocidade e conduzir a remalhagem. O esquema gera malhas contendo um número controlado de elementos, de maneira que o erro do gradiente de velocidade torna-se uniformemente distribuído. O procedimento de remalhagem é totalmente automático e acionado durante uma análise transiente, sempre que a variação relativa do erro estimado excede um valor pré-estabelecido [40].

O algoritmo de passo de tempo local é usado em conjunto com o esquema de remalhagem. Isto permite a conjunção dos refinamentos de passo de tempo e espacial através da eq. 4-80, e conduz naturalmente a um procedimento adaptativo simultâneo no tempo e no espaço. De fato, sempre que o esquema de remalhagem cria algum refinamento local para resolver melhor algum aspecto particular do escoamento, a

distribuição do passo de tempo também é adaptada, de maneira que a evolução temporal correspondente também possa ser seguida apropriadamente.

No apêndice B, apresenta-se detalhadamente o esquema de remalhagem utilizado neste trabalho.

5 EXEMPLOS NUMÉRICOS

A formulação apresentada no capítulo 4 foi usada em algumas análises representativas de escoamentos internos e externos, abrangendo uma larga faixa de número de Mach..

Inicialmente são apresentados exemplos para escoamento de gás perfeito em regime laminar. Estes exemplos permitem validar a formulação compressível/quase-incompressível desenvolvida neste trabalho. Foram usadas as propriedades termodinâmicas e de transporte para o ar. A fórmula de Sutherland [6] foi usada para o cálculo da viscosidade e um número de Prandtl constante de 0,72 foi assumido.

Também são apresentados exemplos para misturas bifásicas água-vapor. Neste caso, os modelos empregados para turbulência e definição da mistura são bastante simplificados. O objetivo da apresentação destes exemplos, porém, é demonstrar o bom comportamento qualitativo da metodologia proposta e indicar um possível caminho para novos desenvolvimentos na área de simulação computacional de escoamentos bifásicos.

5.1 Resultados para Gás Perfeito

5.1.1 Escoamento Cruzado ao Redor de um Cilindro Circular

Este exemplo mostra um problema transiente de um escoamento externo, quase-incompressível. Os números de Mach e de Reynolds para a análise são baseados nas condições de corrente livre. O diâmetro do cilindro D é usado como comprimento de referência.

A figura 1 mostra a formação periódica de vórtices atrás do cilindro para $Re=100$ e $M=0.1$. A figura 2 apresenta duas malhas adaptativas típicas, defasadas de aproximadamente meio período, geradas durante a simulação do transiente. A figura 3 mostra distribuições de densidade e de número de Mach local. A frequência de oscilação obtida da análise numérica produz um número de Strouhal $S_t = f D / u_0 \cong 1/7$, em boa concordância com dados experimentais [41].

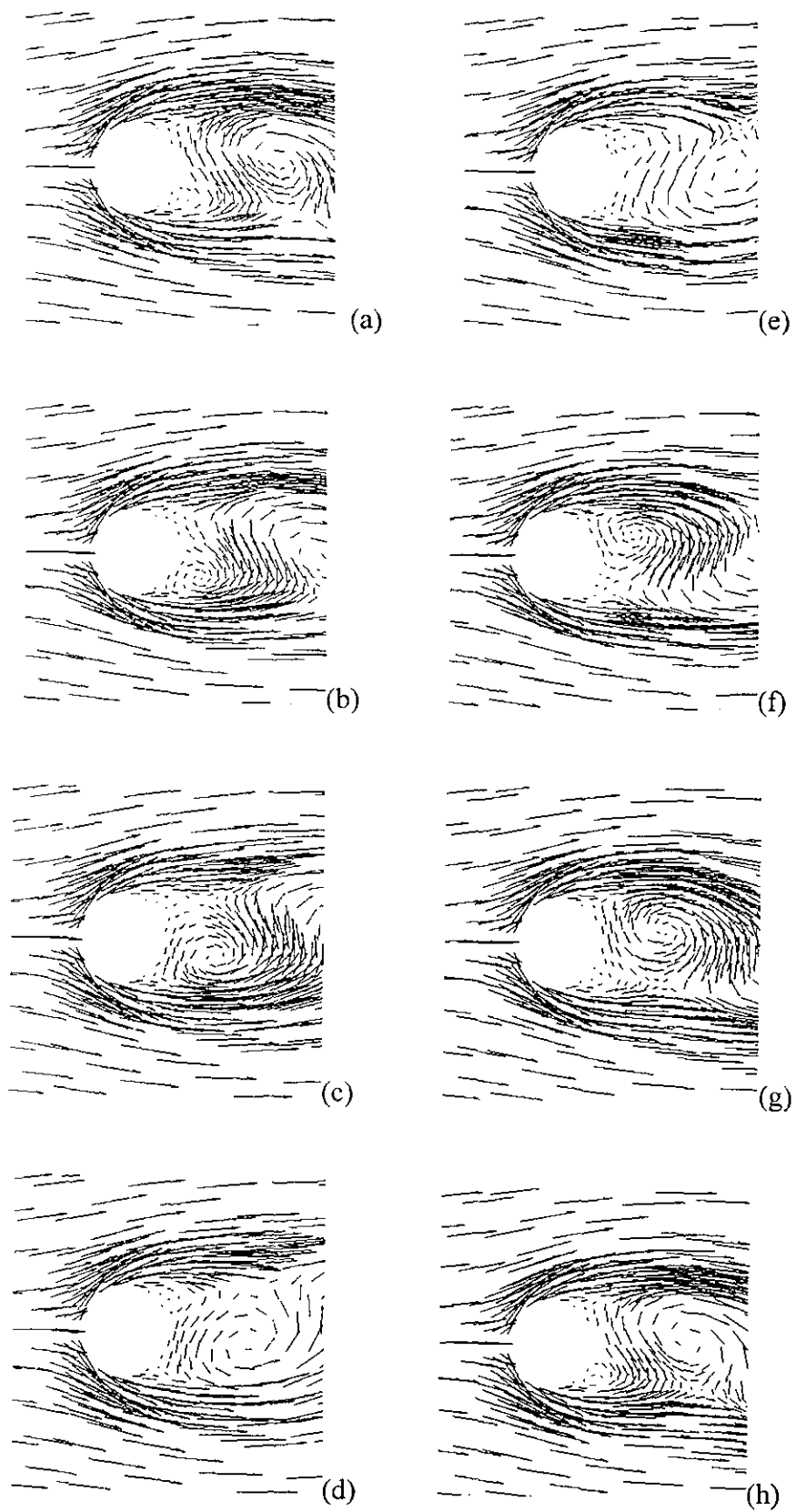


Figura 1 - Formação periódica de vórtices atrás de um cilindro circular em escoamento cruzado para $Re=100$ and $M=0,1$.

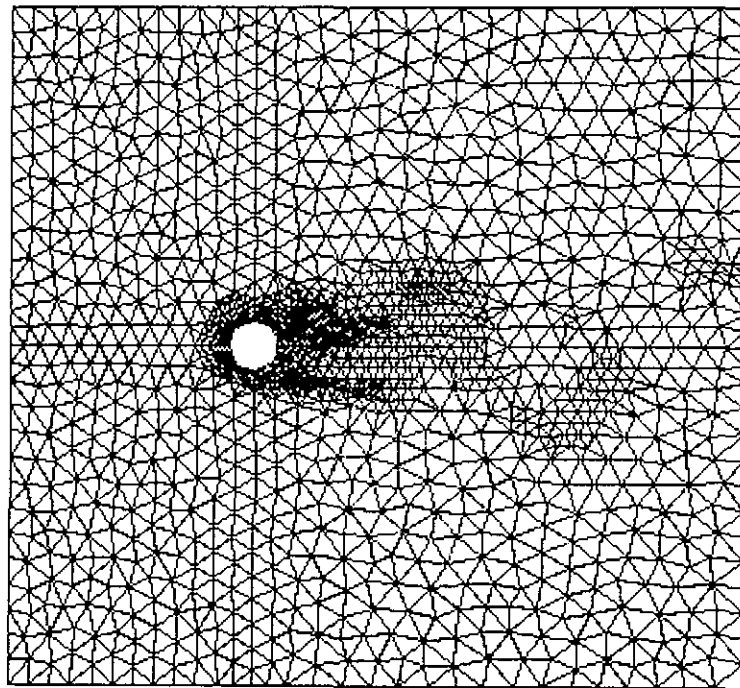
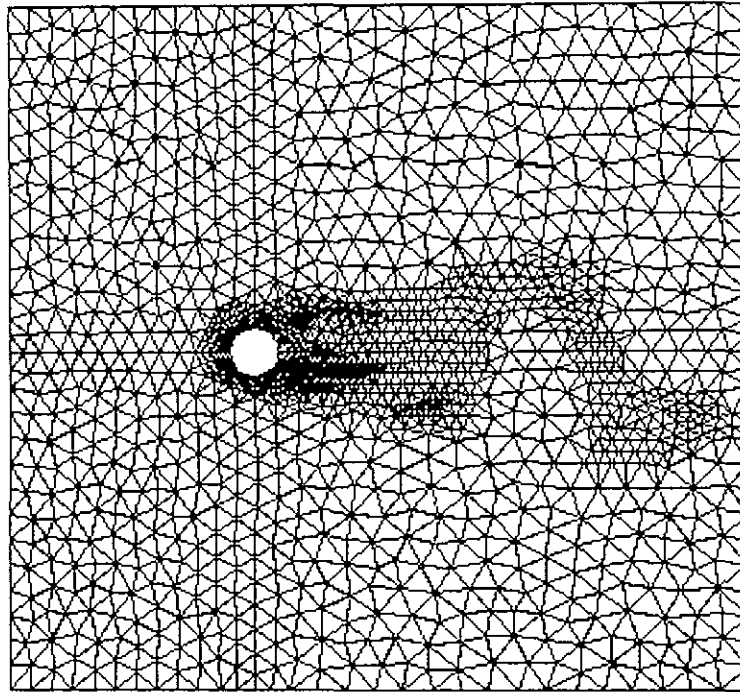


Figura 2 - Malhas adaptativas típicas geradas na simulação do escoamento cruzado ao redor de um cilindro circular.

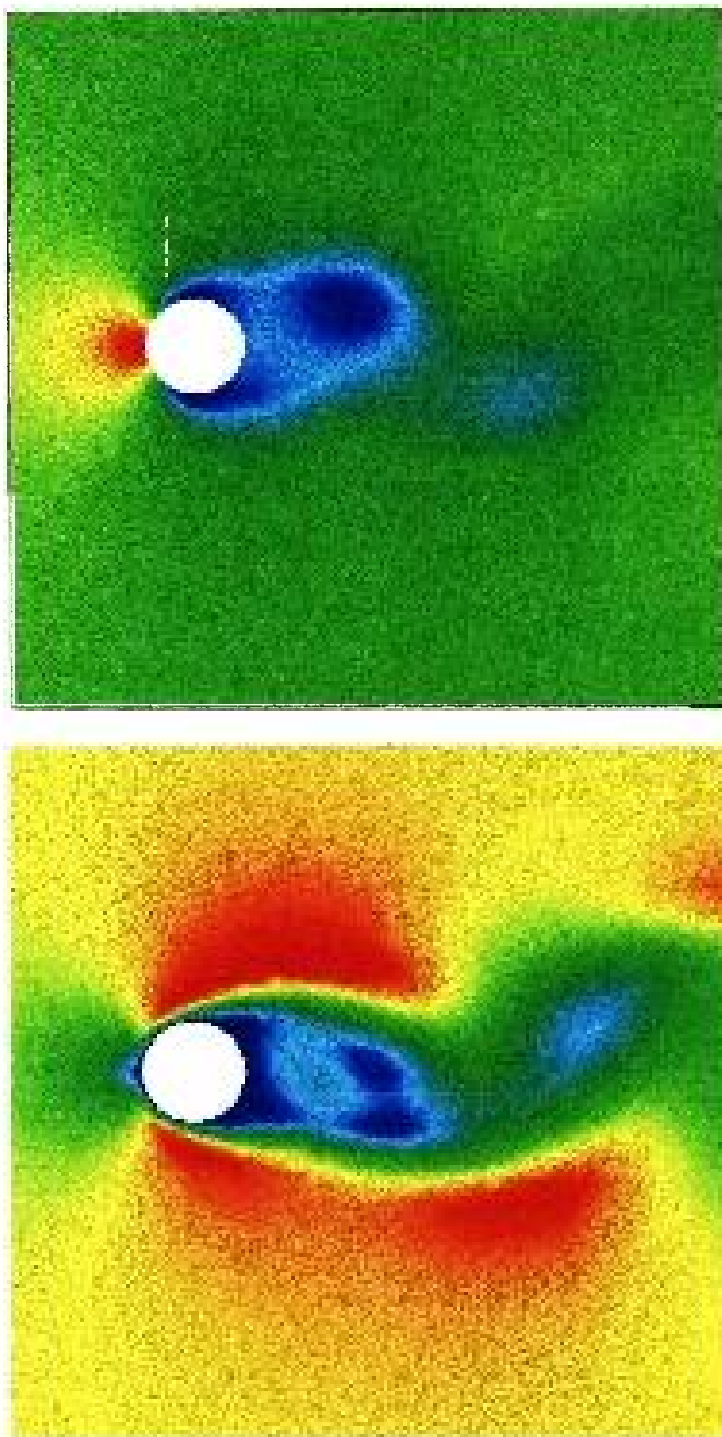


Figura 3 – De cima para baixo: Instantâneo dos campos de densidade e número de Mach local para $Re=100$ and $M=0,1$.

5.1.2 Estratificação térmica em uma Cavity Quadrada.

Neste problema o ar está inicialmente parado e em equilíbrio térmico a uma temperatura inicial $\theta_0 = 300\text{ K}$. Subitamente é aplicada uma diferença de temperatura entre as paredes verticais e o fluido começa a se mover. As temperaturas das paredes esquerda e direita são mantidas respectivamente em $\theta_D = 297\text{ K}$ e $\theta_E = 303\text{ K}$. As paredes horizontais são consideradas adiabáticas. Condições de contorno de não-deslizamento nas paredes são utilizadas. As condições de contorno de temperatura impostas, induzem forças de empuxo e levam a um escoamento estratificado, em convecção natural, dentro da cavidade. Os resultados são parametrizados pelos números de Grashof ($Gr = \rho_0^2 |g| \beta_v \Delta\theta L^3 / \mu_0^2$) e Prandtl. A altura da cavidade é escolhida como comprimento característico. As propriedades termodinâmicas e de transporte de referência são aquelas correspondentes ao estado inicial.

A figura 4 mostra os resultados para $Gr Pr = 10^5$ e $Pr=0,72$, depois de atingido o estado estacionário. É interessante notar que o número de Mach local máximo atingido na análise é menor que $8 \cdot 10^{-5}$. A figura 5 mostra os resultados do Flotran [42] e de DeVahl [43]. Boa concordância com as referências [42] e [43] foi obtida.

5.1.3 Escoamento Compressível em torno de um aerofólio NACA0012

Dois exemplos de escoamento externo compressível em torno de um aerofólio NACA0012 são apresentados. Em ambos os casos as propriedades de referência e a velocidade de referência são aquelas correspondentes à corrente livre. Apenas a solução estacionária é procurada nestes exemplos, de modo que o cálculo com passos de tempo locais é realizado sem o uso da sincronização descrita na seção 4.4.

O primeiro exemplo corresponde a um escoamento transônico, com ângulo de ataque nulo, e números de Mach e Reynolds de $M=0,85$ e $Re=500$, respectivamente. A temperatura de estagnação correspondente à corrente livre é especificada como temperatura prescrita sobre a superfície do aerofólio. As figuras 6 a 12 ilustram este

exemplo. O fator de fricção obtido apresenta boa concordância com os resultados de NIGRO *et al.*[44] e SHAKIB [45] apresentados na figuras 12.

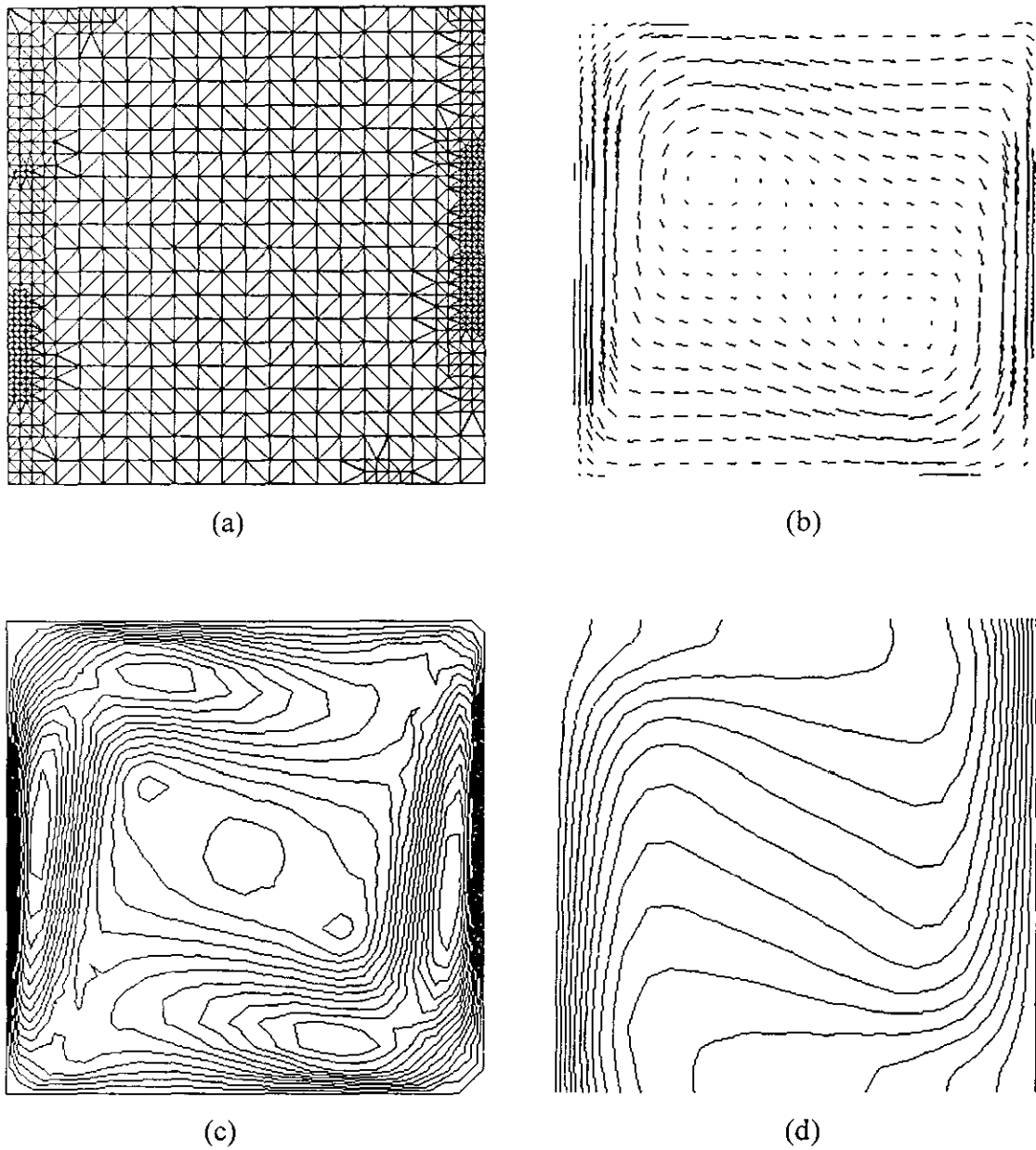


Figura 4 - Solução estacionária para convecção natural em uma cavidade quadrada com $GrPr=10^5$ e $Pr=0,72$: (a) malha adaptada; (b) campo de velocidade; (c) isolinhas do número de Mach local; (d) isolinhas de temperatura.

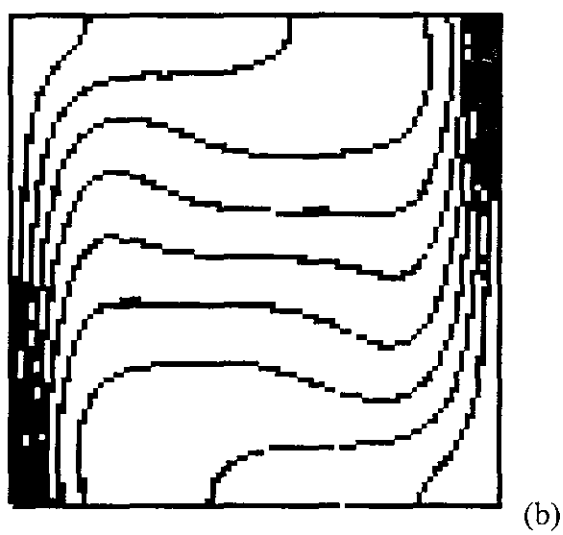


Figura 5 - Solução estacionária para convecção natural em uma cavidade quadrada com $GrPr=10^5$ e $Pr=0,71$. Isolinhas de Temperatura - (a) Flotran (b) DeVahl

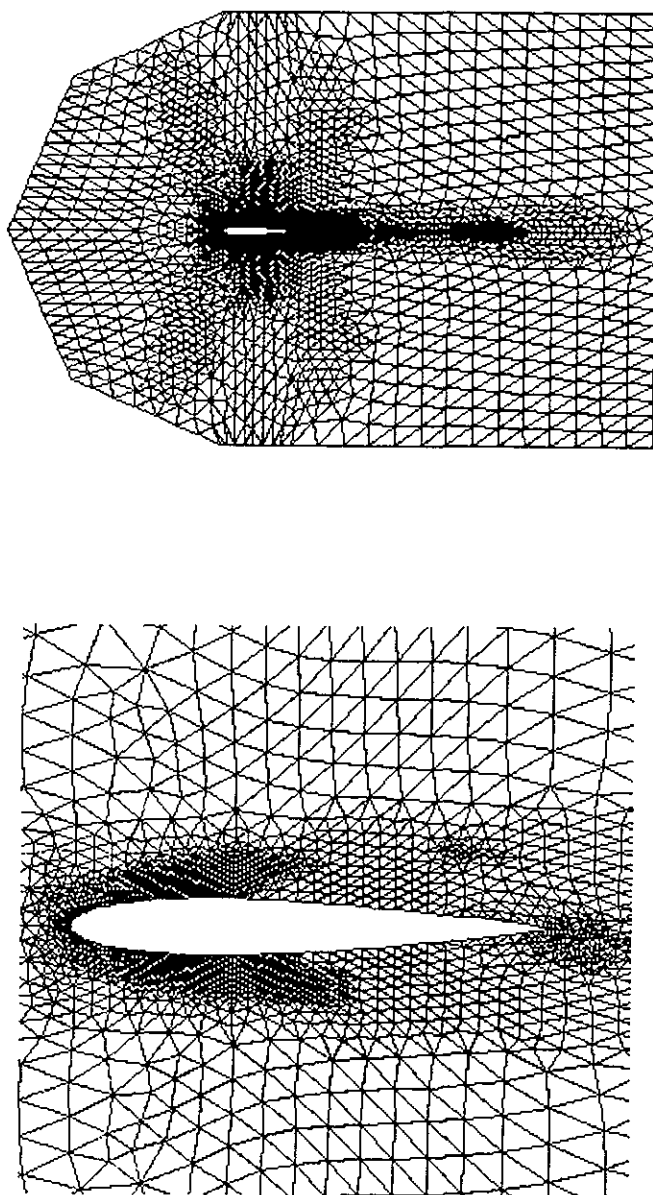


Figura 6 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. De cima para baixo: Malha adaptativa e detalhe do refinamento junto do aerofólio NACA0012.

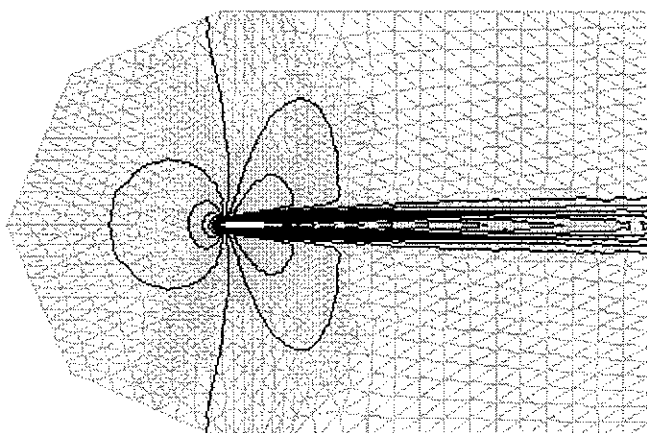
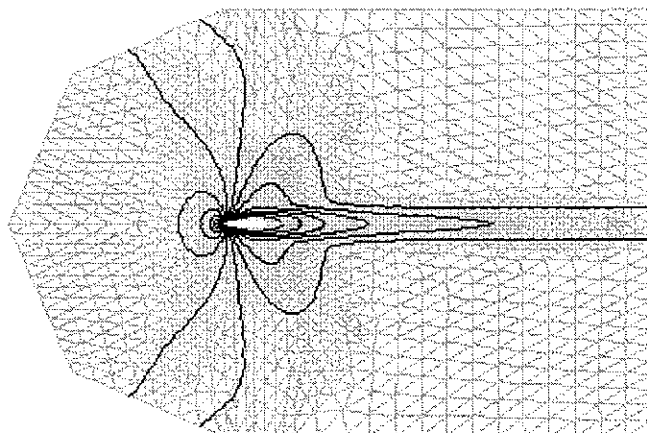


Figura 7 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. De cima para baixo: Isolinhas de densidade e de número de Mach local, no estacionário.

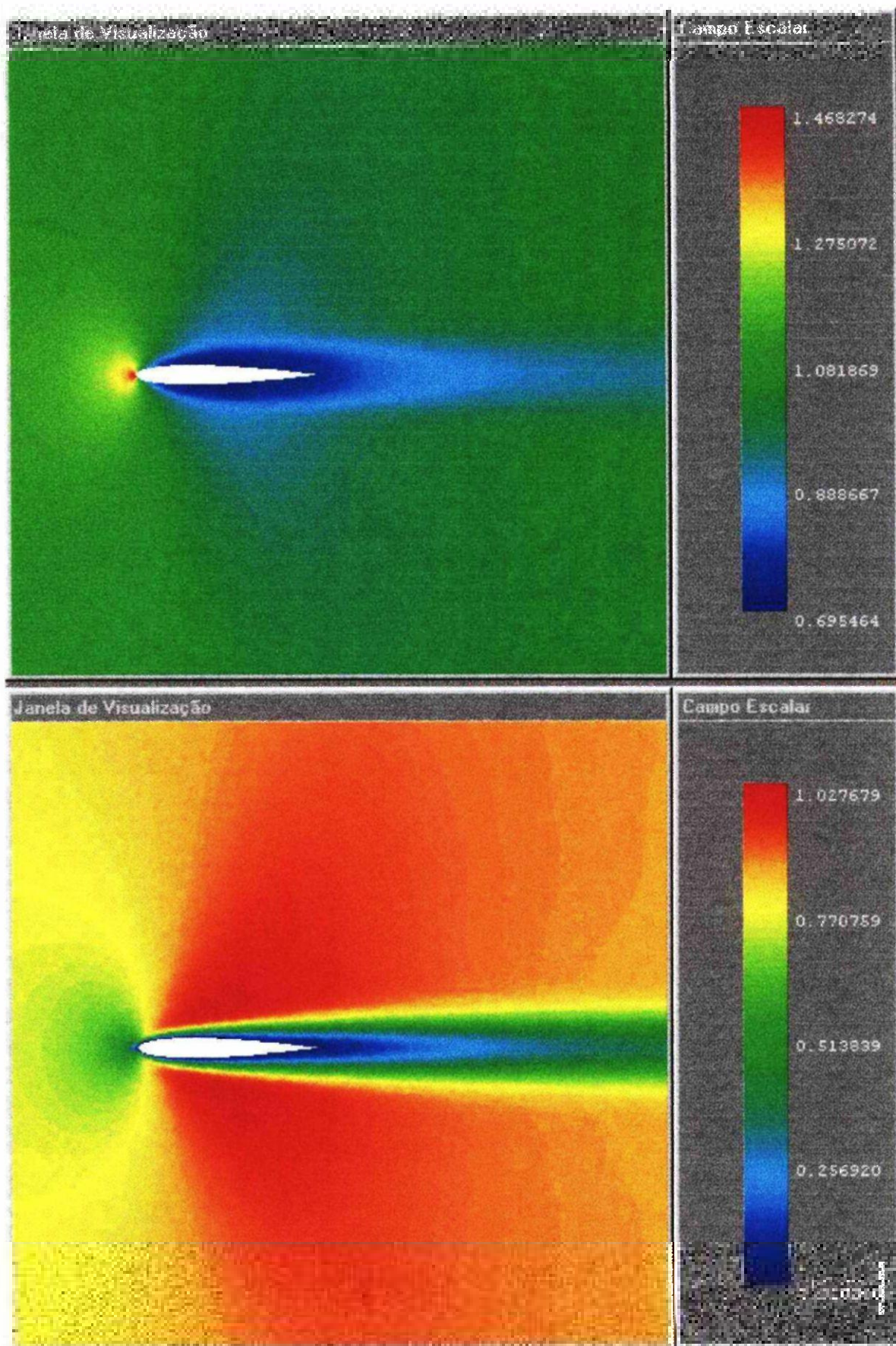


Figura 8 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. De cima para baixo: Campos de densidade e de número de Mach local, no estacionário.

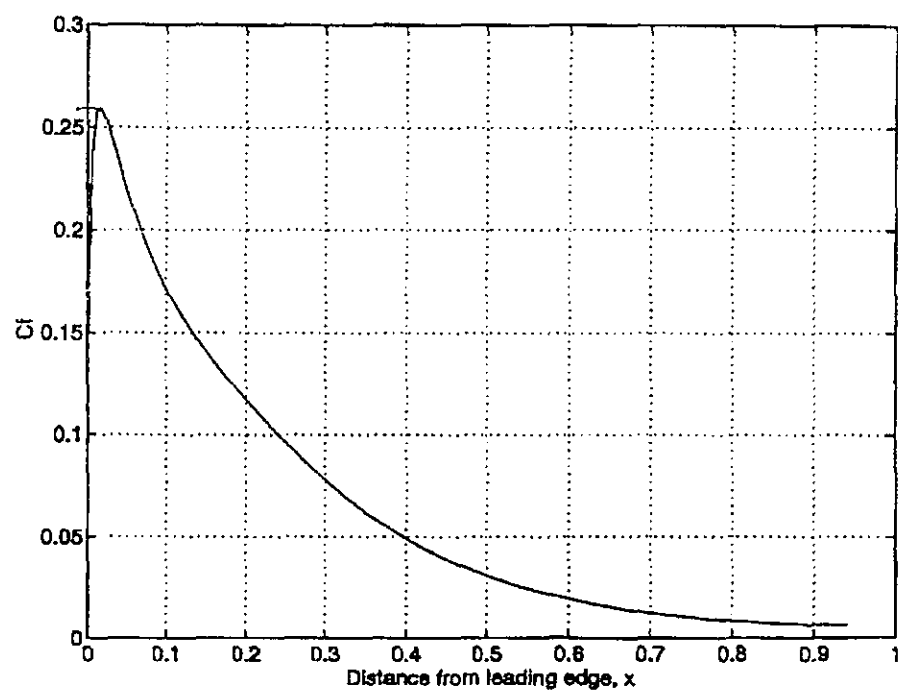
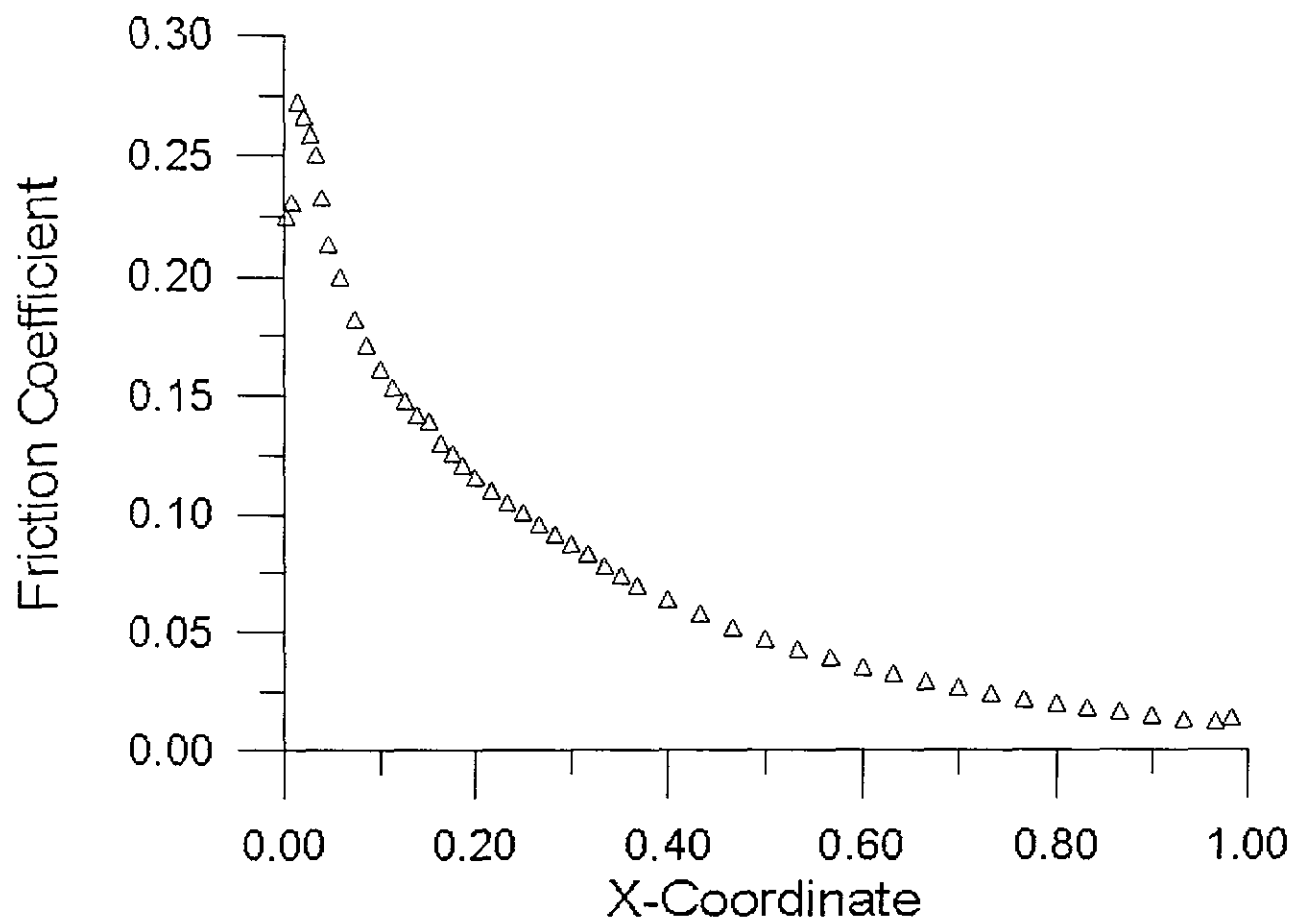


Figura 9 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. Coeficiente de fricção ao longo da corda do aerofólio NACA0012. De cima para baixo: Resultados deste trabalho e de NIGRO et al. [44].

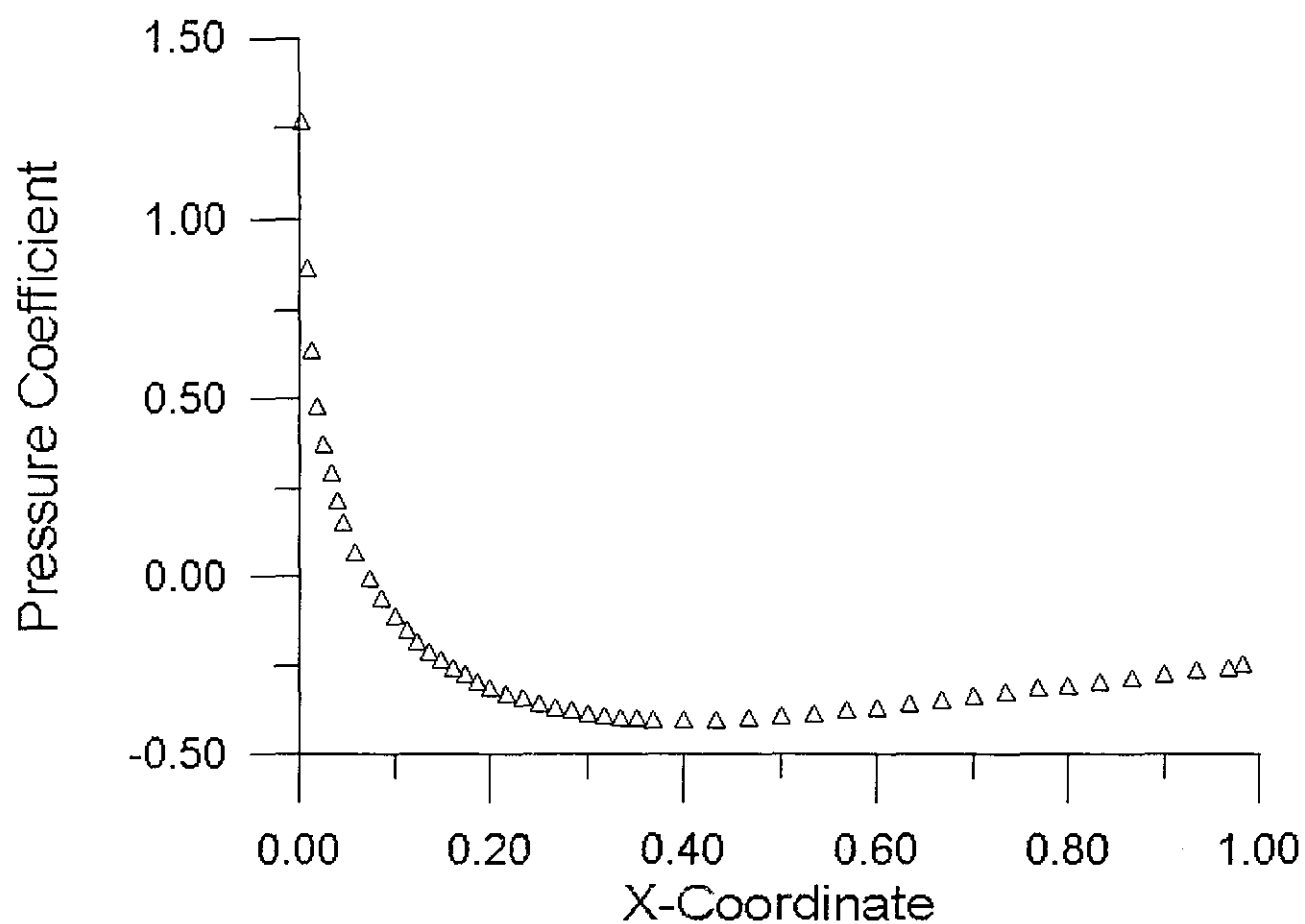


Figura 10 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. Coeficiente de pressão ao longo da corda do aerofólio NACA0012.

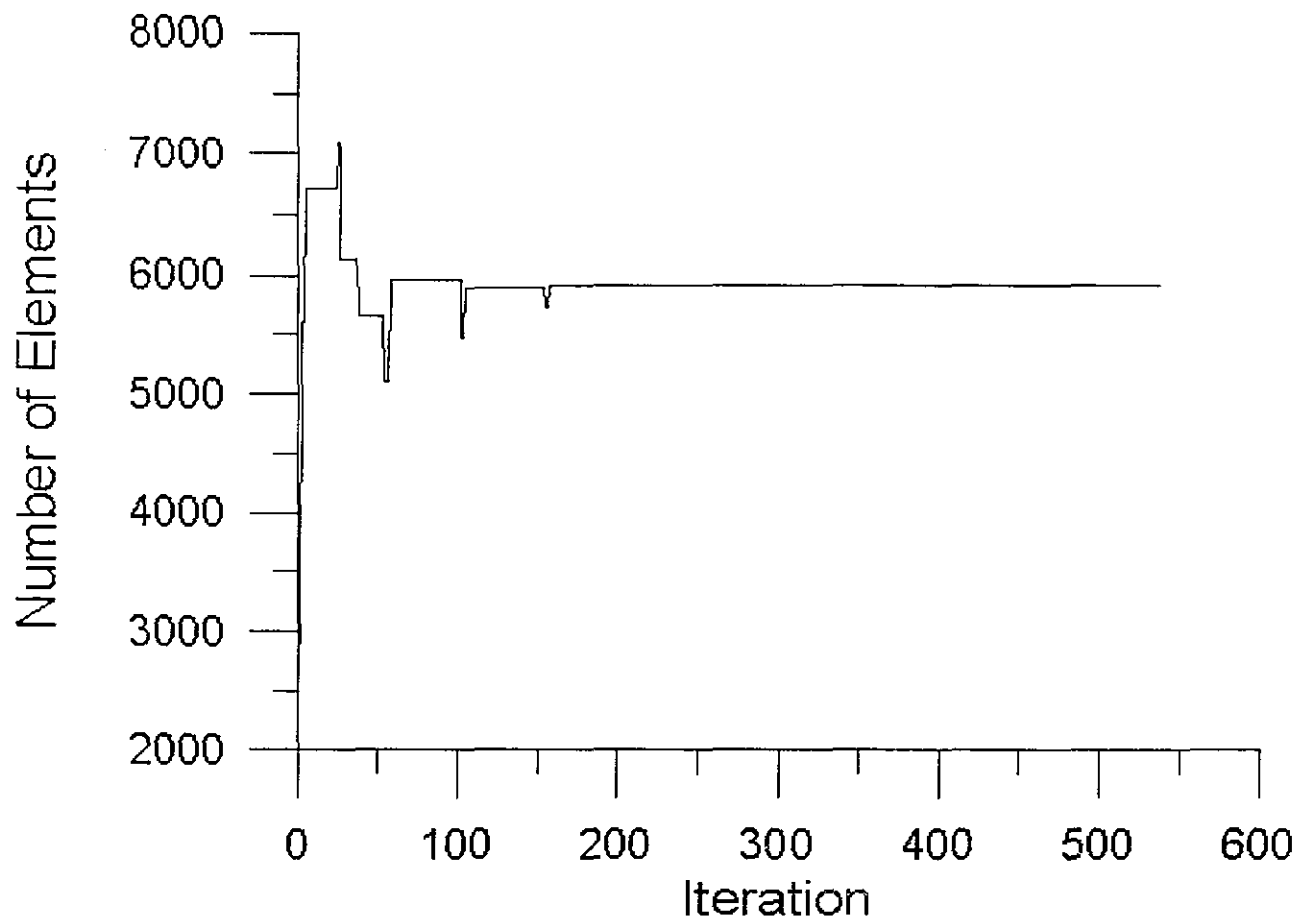


Figura 11 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. Evolução do número de elementos empregados na análise.

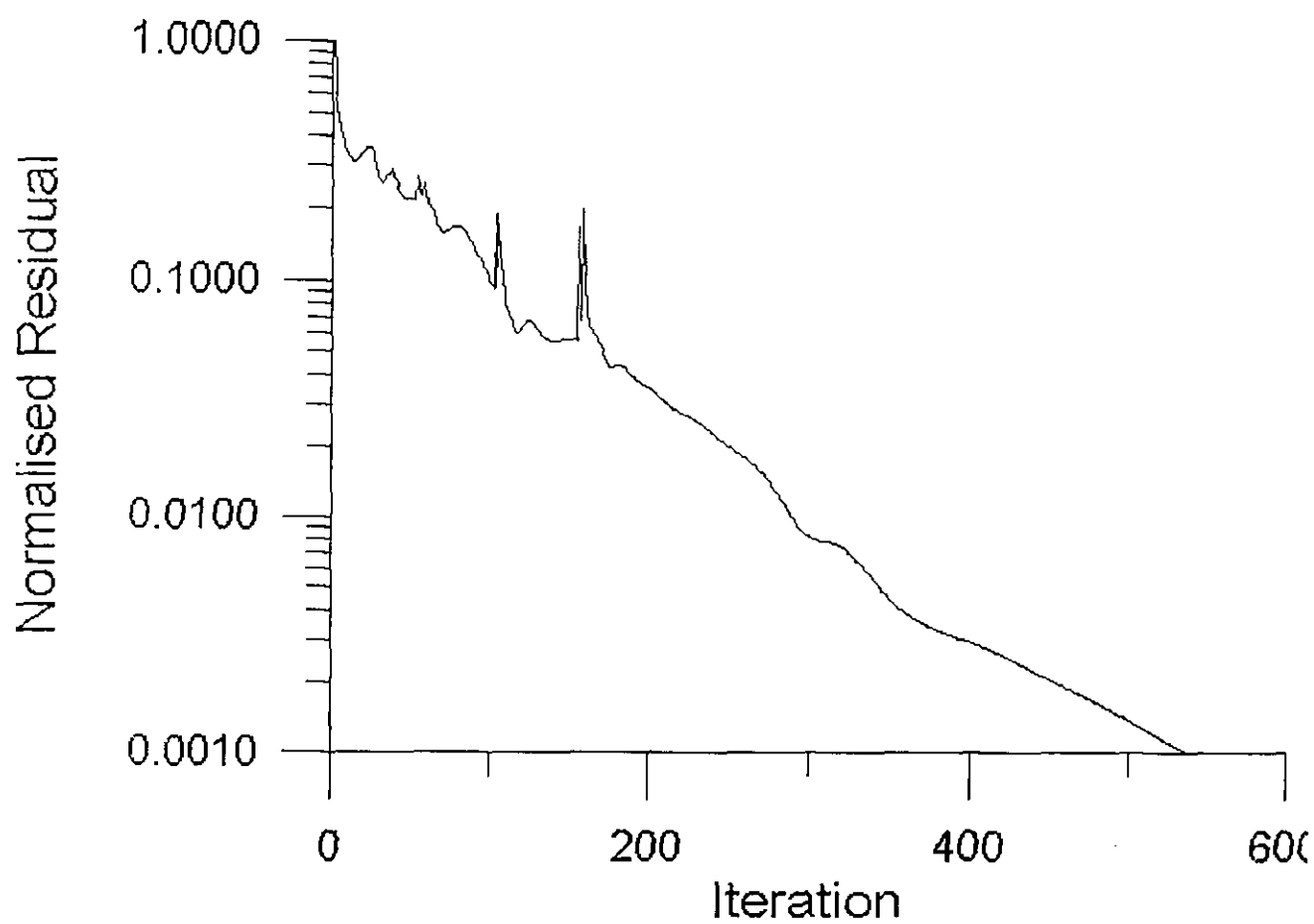


Figura 12 – Escoamento transônico com $M=0,85$, $Re=500$. Evolução do resíduo normalizado durante a análise.

O segundo exemplo corresponde a um escoamento supersônico com $M=2$ e $Re=106$ e ângulo de ataque de 10 graus. Neste exemplo a superfície do aerofólio foi considerada adiabática. As figuras 13, 14 e 15 ilustram os resultados obtidos. Os resultados apresentam boa concordância com o cálculos de DUTTO [46] (figura 16) e com os resultados experimentais apresentados por ALLÈGRE *et al.* [47] (figura 17).

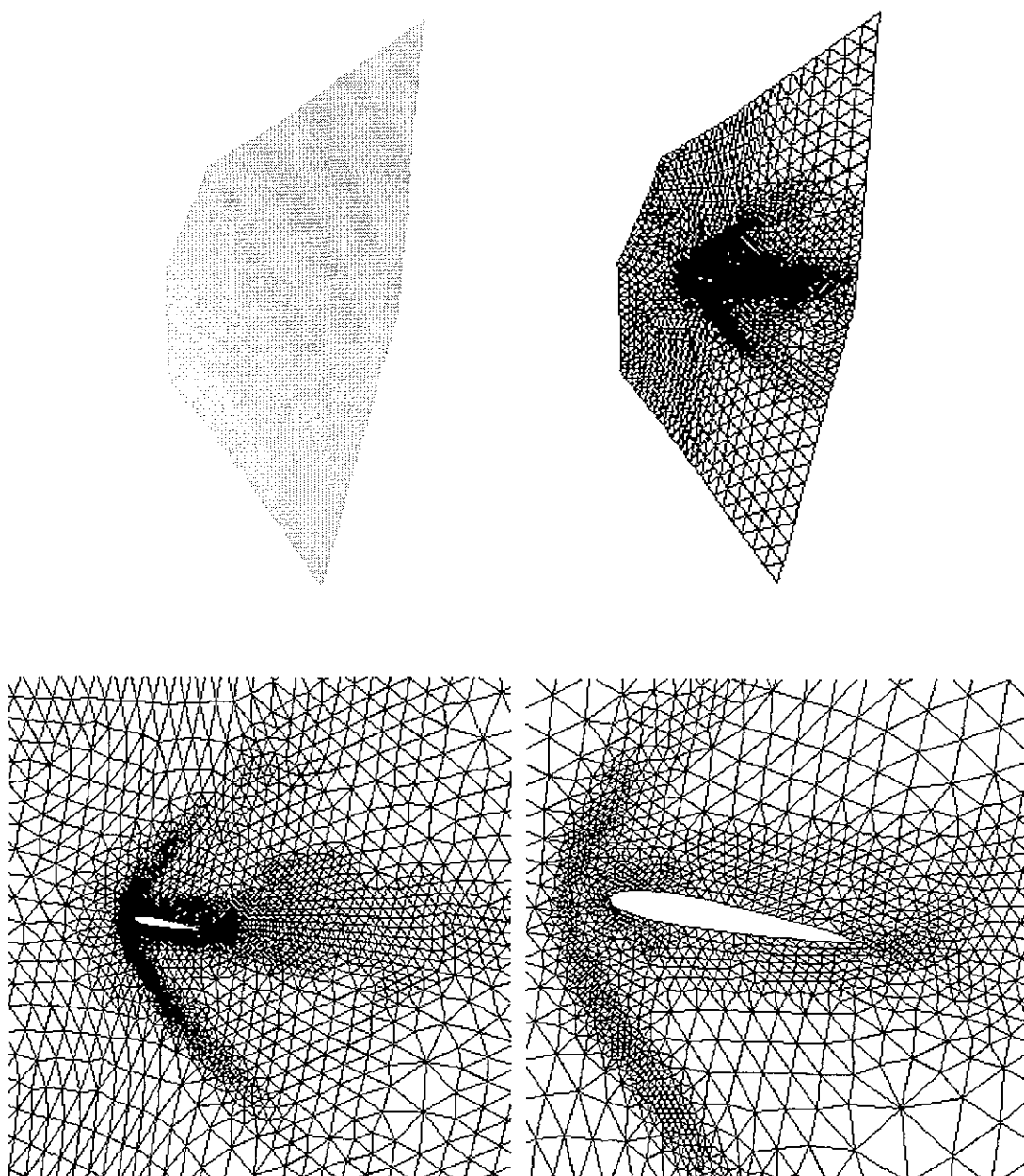


Figura 13 – Escoamento supersônico com ângulo de ataque de 10 graus, $M=2.0$ e $Re=106$. Malha adaptativa final contendo 5214 elementos e 2687 nós. Refinamento junto ao choque frontal e à camada limite.

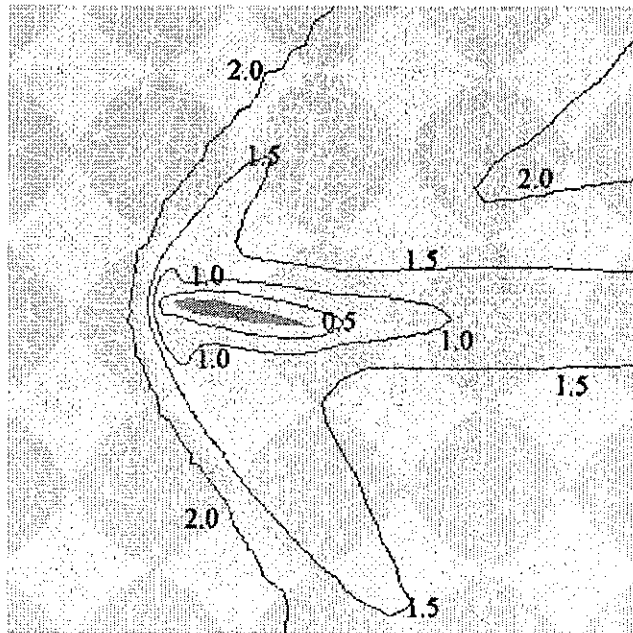
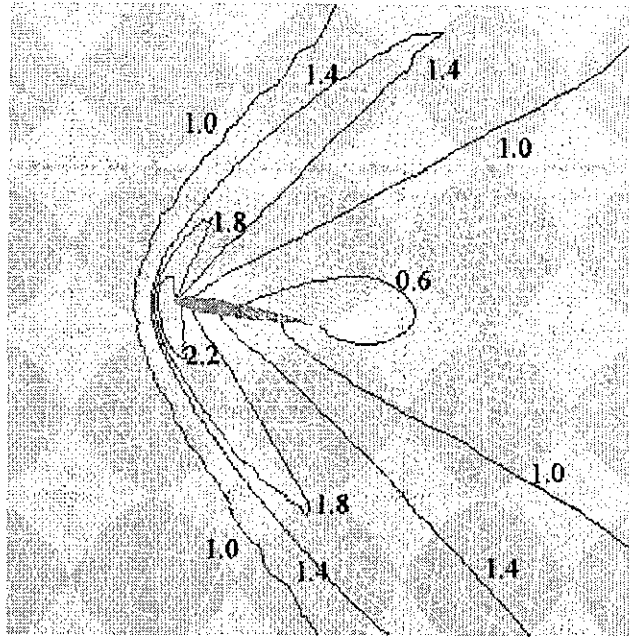


Figura 14 – Escoamento supersônico com ângulo de ataque de 10 graus, $M=2.0$ e $Re=106$. De cima para baixo: Curvas de densidade e de número de Mach local, no estacionário.

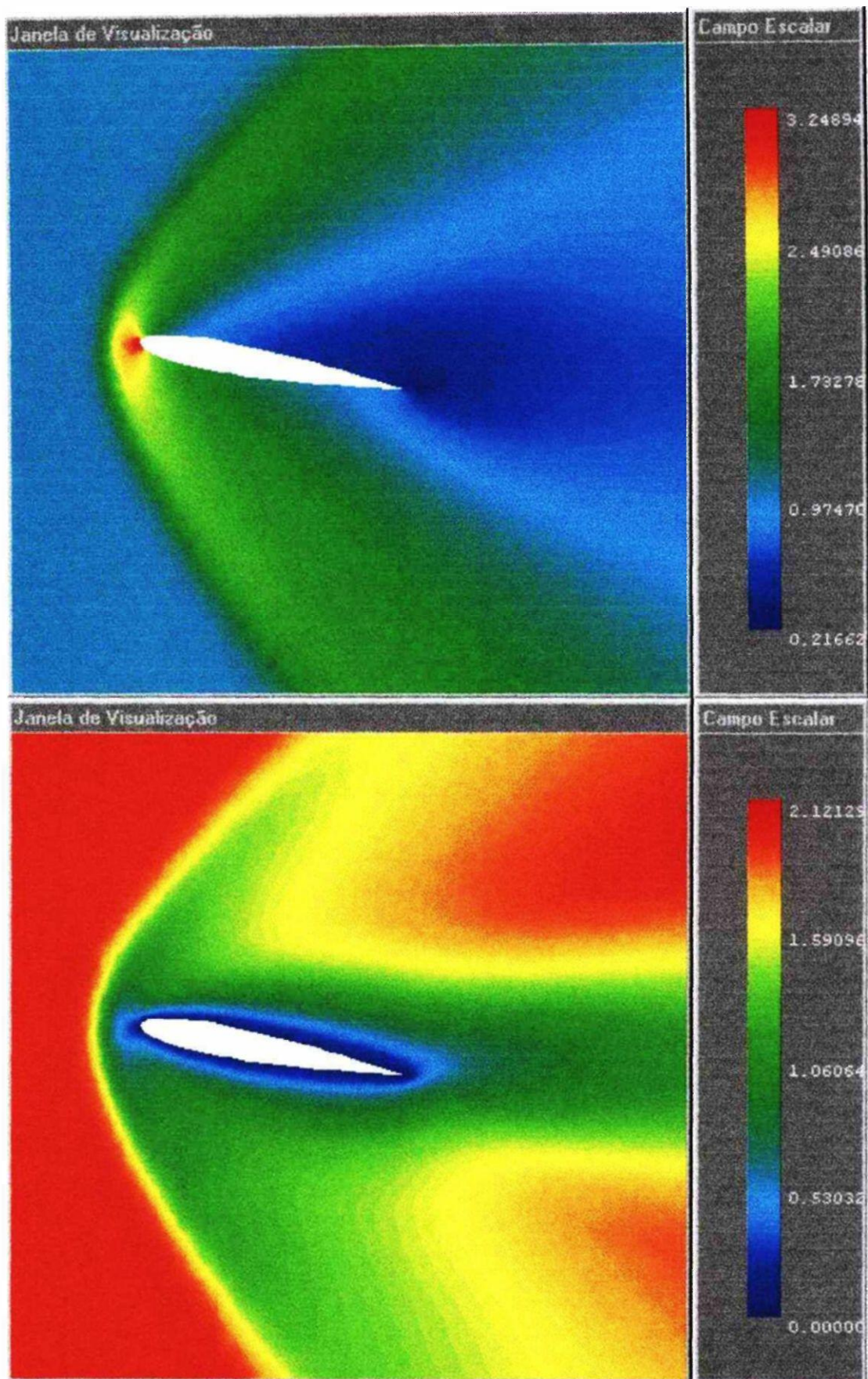


Figura 15 - Escoamento supersônico com ângulo de ataque de 10 graus, $M=2,0$ e $Re=106$. De cima para baixo: Campos de densidade e de número de Mach local, no estacionário.

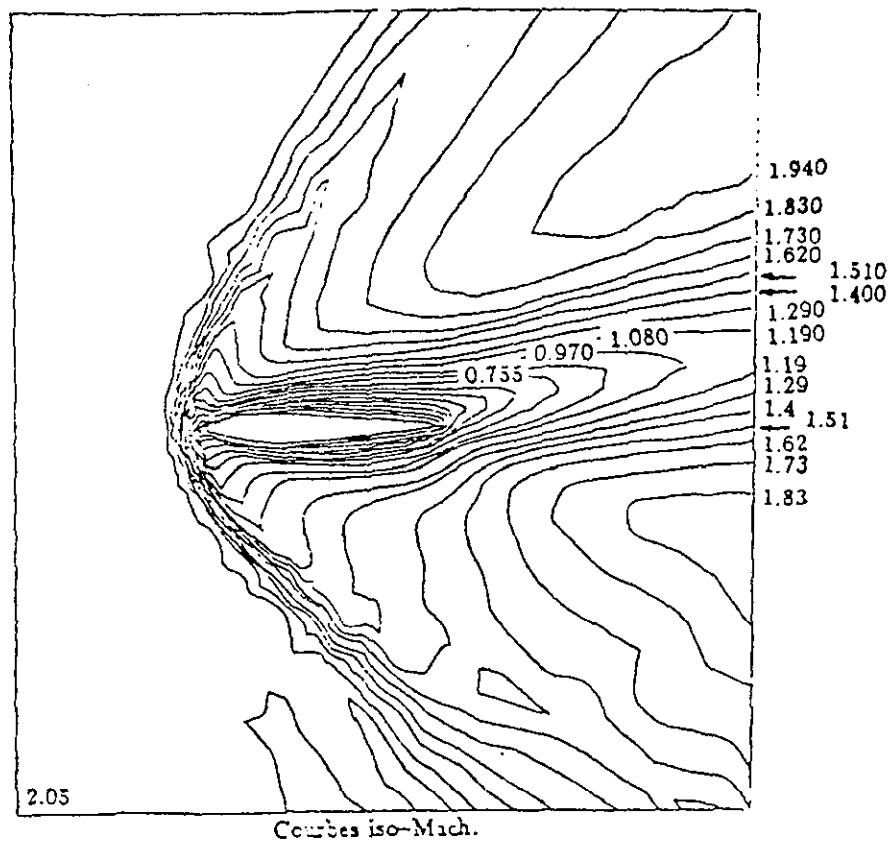
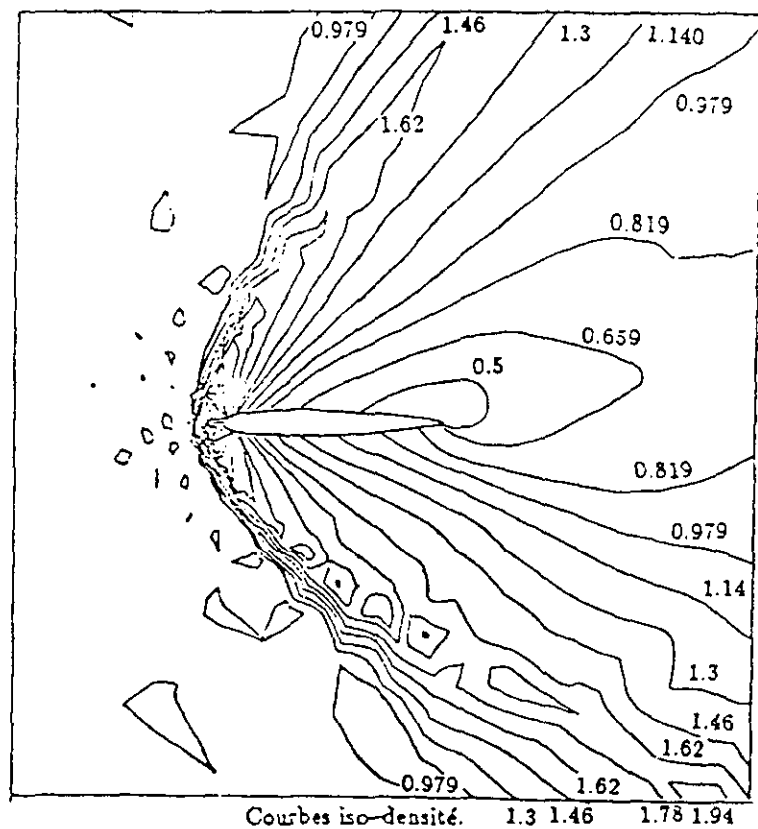


Figura 16 – Escoamento supersônico com ângulo de ataque de 10 graus, $M=2,0$ e $Re=106$. De cima para baixo: Curvas de densidade e de número de Mach local, no estacionário. Resultados de DUTTO [46].

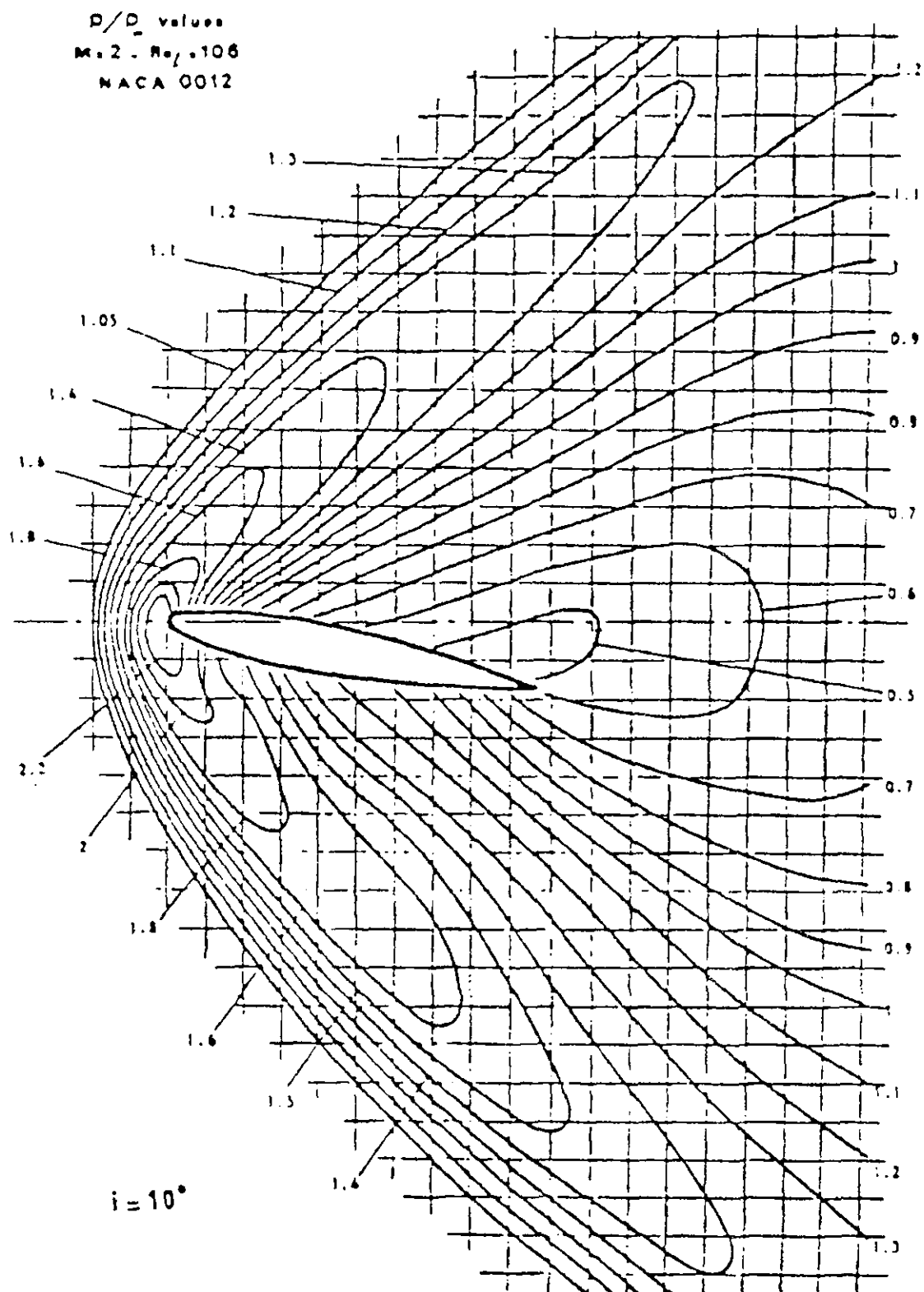


Figura 17 – Escoamento supersônico com ângulo de ataque de 10 graus, $M=2,0$ e $Re=106$. Curvas de densidade, no estacionário. Resultados de ALLÈGRE et al. [47].

5.1 Resultados para Mistura Água-Vapor

Para a análise de escoamento água-vapor, algumas considerações importantes devem ser enfatizadas. Inicialmente, note que as propriedades termodinâmicas e de transporte da mistura bifásica são mostradas no apêndice C.

Em particular, a representação do fluxo de calor na equação de energia foi modificada e consequentemente o número de Peclet para cálculo do passo de tempo local foi alterado. O termo de fluxo de calor é dado por:

$$\hat{q}_h'' = - \left[\frac{k}{c_v} + \frac{Pr}{\gamma Pr_t} \mu_t \right] \frac{\partial \hat{e}''}{\partial x_h}$$

eq. 5-1

Assim, o número de Peclet (eq. 4-86) torna-se

$$C_{pe} = \frac{\rho \|\mathbf{u}''\| h_e}{\gamma_0 \left[\frac{k}{c_v} + \frac{Pr}{\gamma Pr_t} \mu_t \right]} Re Pr$$

eq. 5-2

Uma outra alteração importante no código computacional diz respeito à remalhagem adaptativa. O grau de refinamento da malha é baseado tanto no erro estimado do gradiente de velocidade quanto no erro estimado da qualidade de vapor local.

Dois exemplos são apresentados. O primeiro mostra mudança de fase causada por efeitos de compressibilidade, enquanto que no segundo caso a mudança de fase acontece em razão da adição de calor .

5.2.1 Escoamento com Estrangulamento entre Duas Placas Horizontais.

Apresenta-se o escoamento de vapor entre duas placas paralelas com estrangulamento. Inicialmente o vapor está parado e em condições saturadas. No instante $t=0$ vapor nas mesmas condições termodinâmicas é injetado na seção de entrada (à esquerda do domínio). Condições de contorno adiabáticas e de não deslizamento são aplicadas nas paredes sólidas. As condições termodinâmicas iniciais e a velocidade prescrita na entrada são utilizadas para definir os números de Reynolds e Eckert da análise ($Re=182$, $Ec=1.81$).

Note que a injeção de vapor provoca uma transiente de pressão. Nas regiões comprimidas ocorre condensação de vapor. As figuras 15, 16 e 17 mostram a evolução deste transiente. O fenômeno é bastante compressível e condições supersônicas são atingidas, como mostra a figura 17.

5.2.2 Escoamento com Aquecimento entre Duas Placas Verticais.

Inicialmente água subresfriada de 1 K encontra-se escoando, de baixo para cima, entre placas verticais paralelas. A velocidade e as condições termodinâmicas iniciais definem os números de Reynolds e Eckert da análise ($Re=801$, $Ec=4,93 \cdot 10^{-9}$). Subitamente é aplicado um fluxo de calor nas paredes iniciando um processo de aquecimento seguido de ebulição.

A figura 18 mostra que inicialmente a ebulição é nucleada e localiza-se apenas nas paredes, enquanto que a maior parte do fluido encontra-se subresfriado (*subcooled boiling*). Por outro lado, na figura 20 o fluido, em quase sua totalidade, encontra-se em condições saturadas, ocorrendo ebulição generalizada (*bulk boiling*).

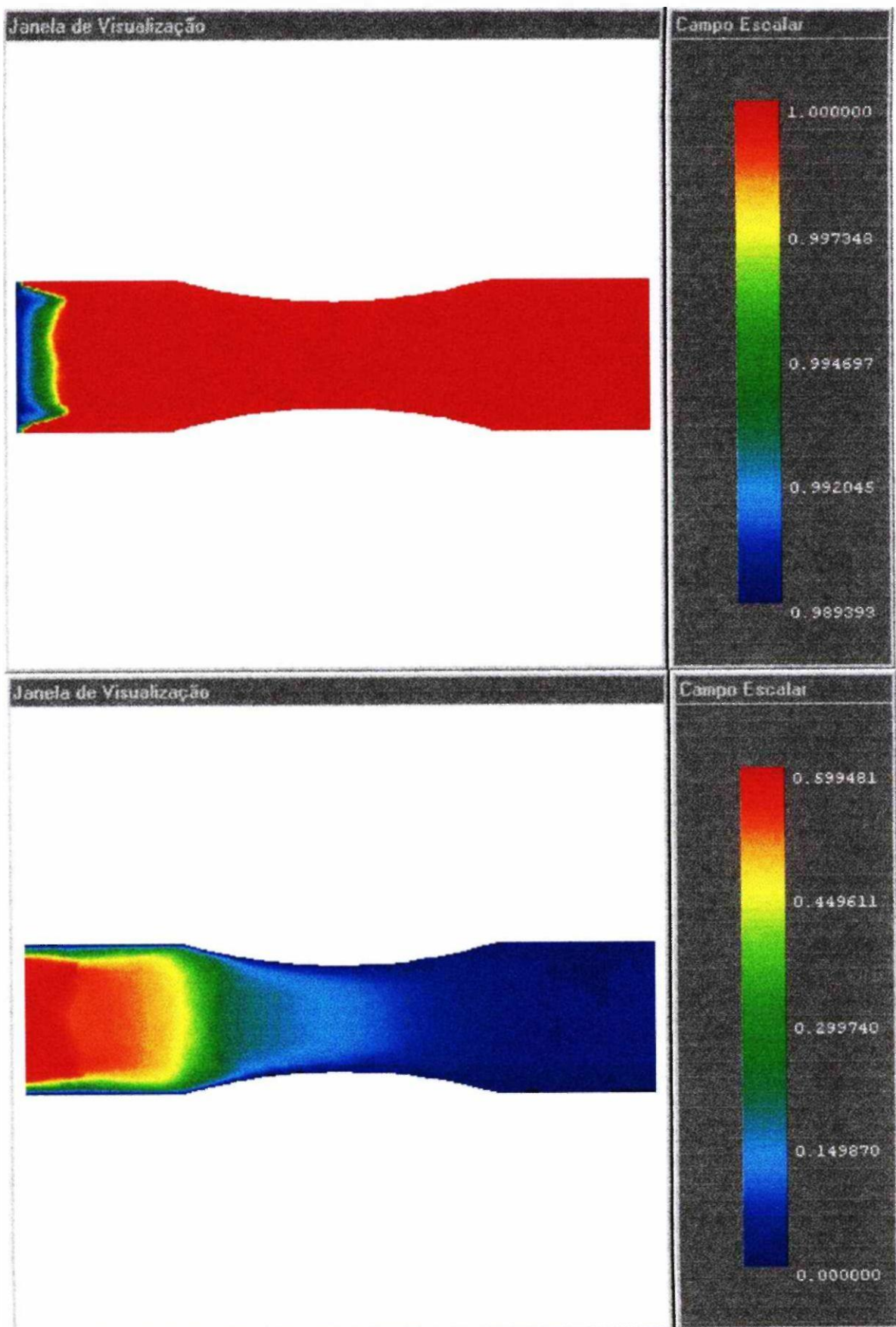


Figura 15 - De cima para baixo: Campos da qualidade de vapor (x) e número de Mach local (M) no instante t_1 .

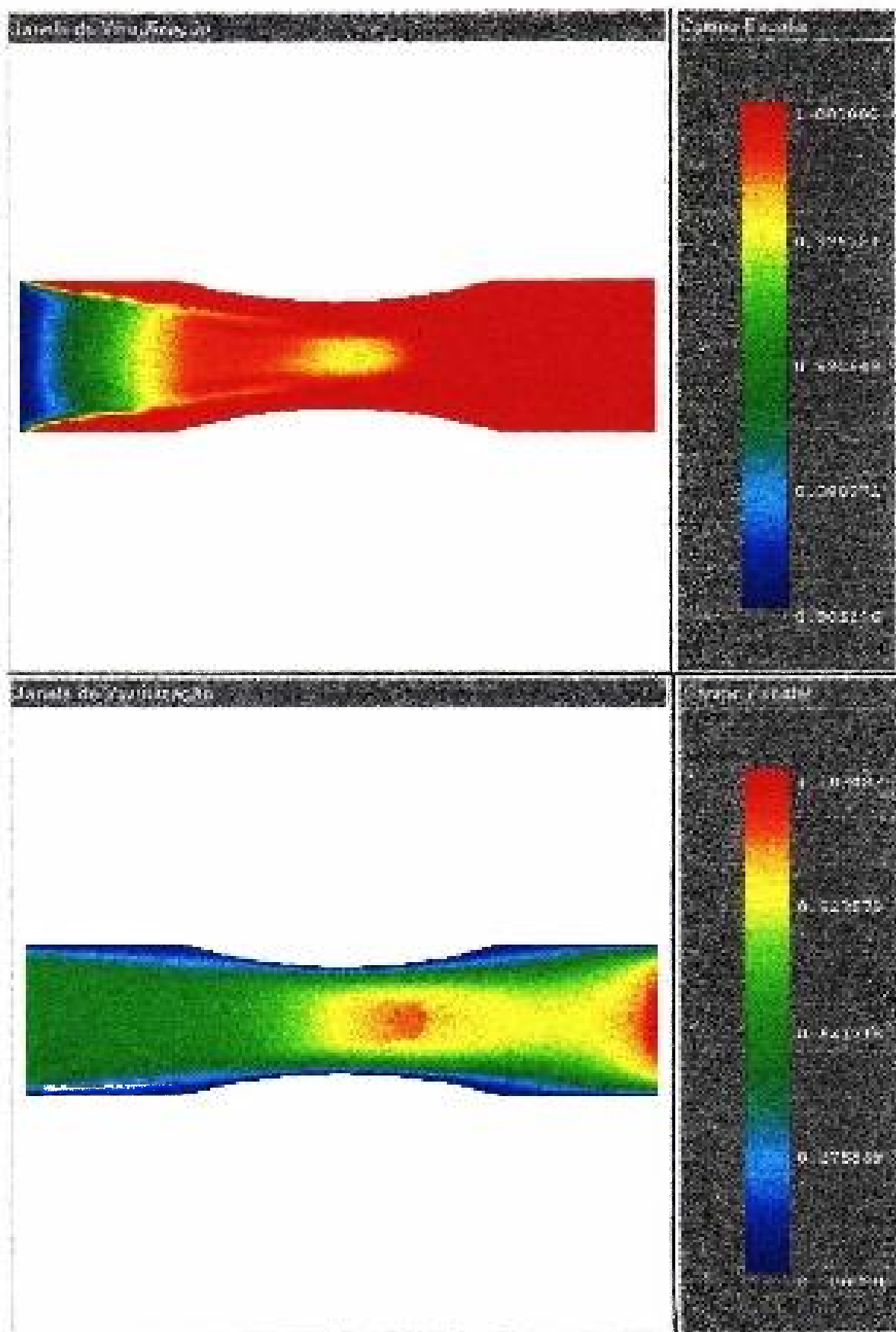


Figura 16 - De cima para baixo: Campos da qualidade de vapor (x) e número de Mach local (M) no instante t_2 .

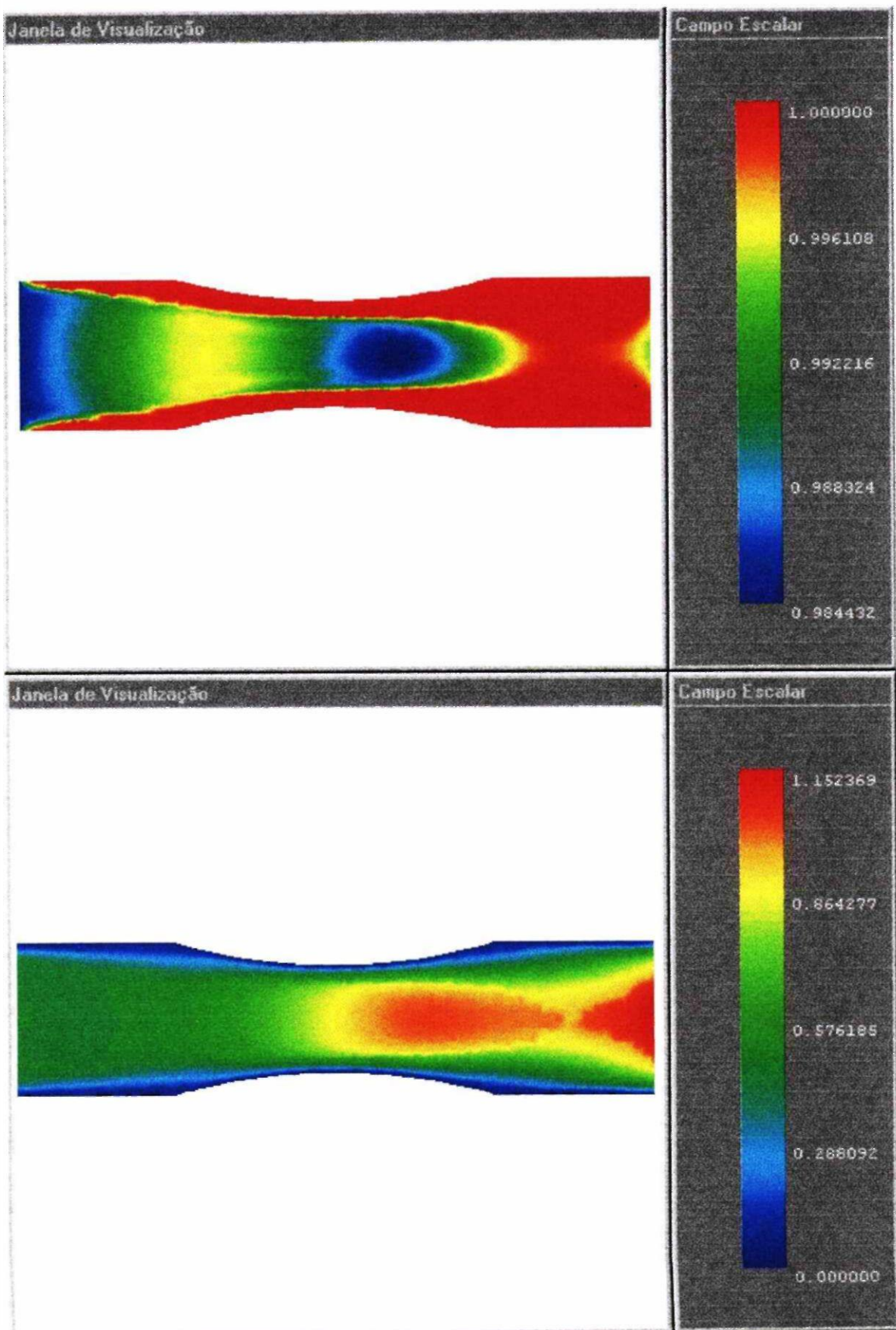


Figura 17 - De cima para baixo: Campos da qualidade de vapor (x) e número de Mach local (M) no instante t_3 .

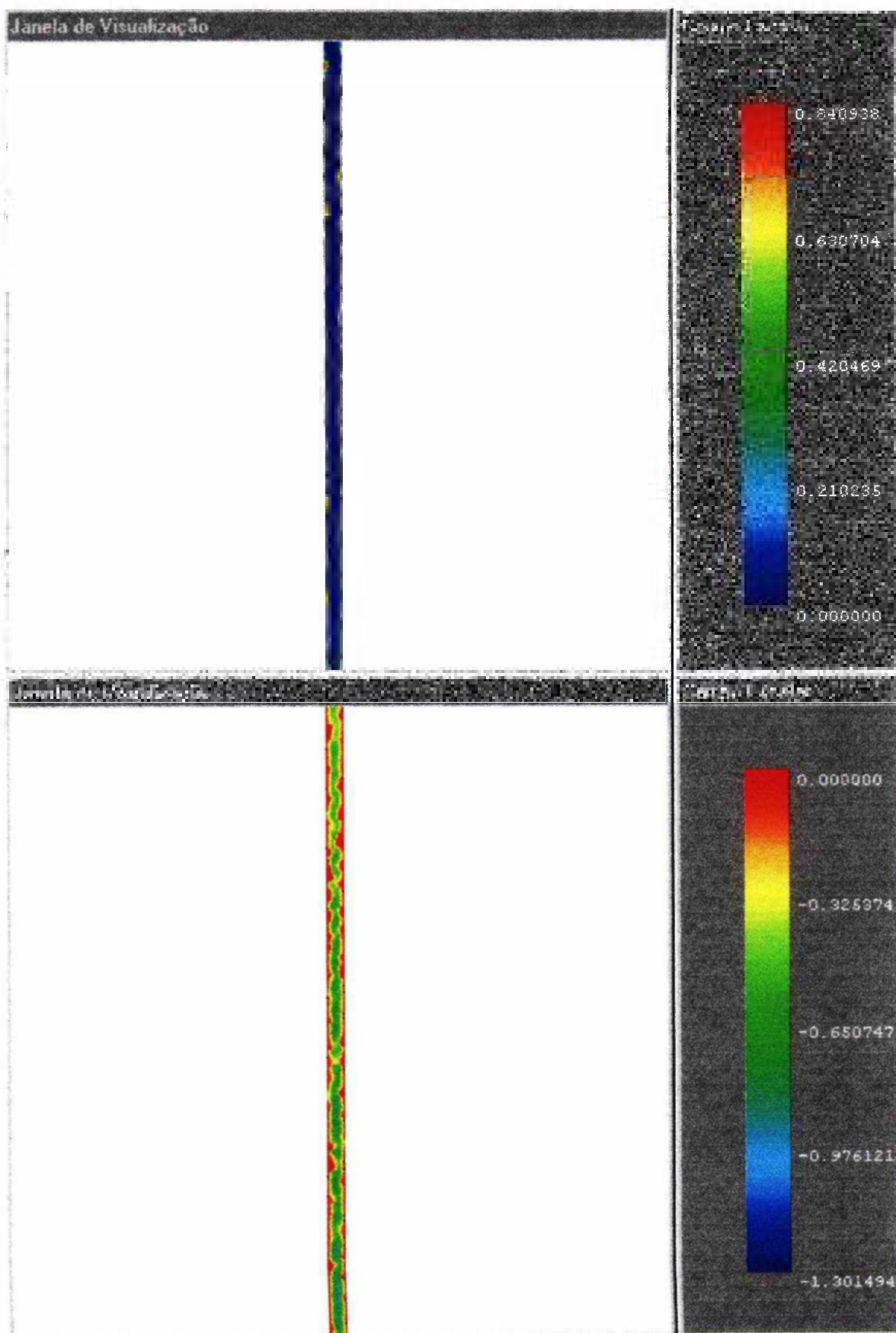


Figura 18 - De cima para baixo: Campos da fração de vazio (ϕ) e diferença de temperatura ($\Delta T_{sat} = T - T_{sat}$), no instante t_1 .

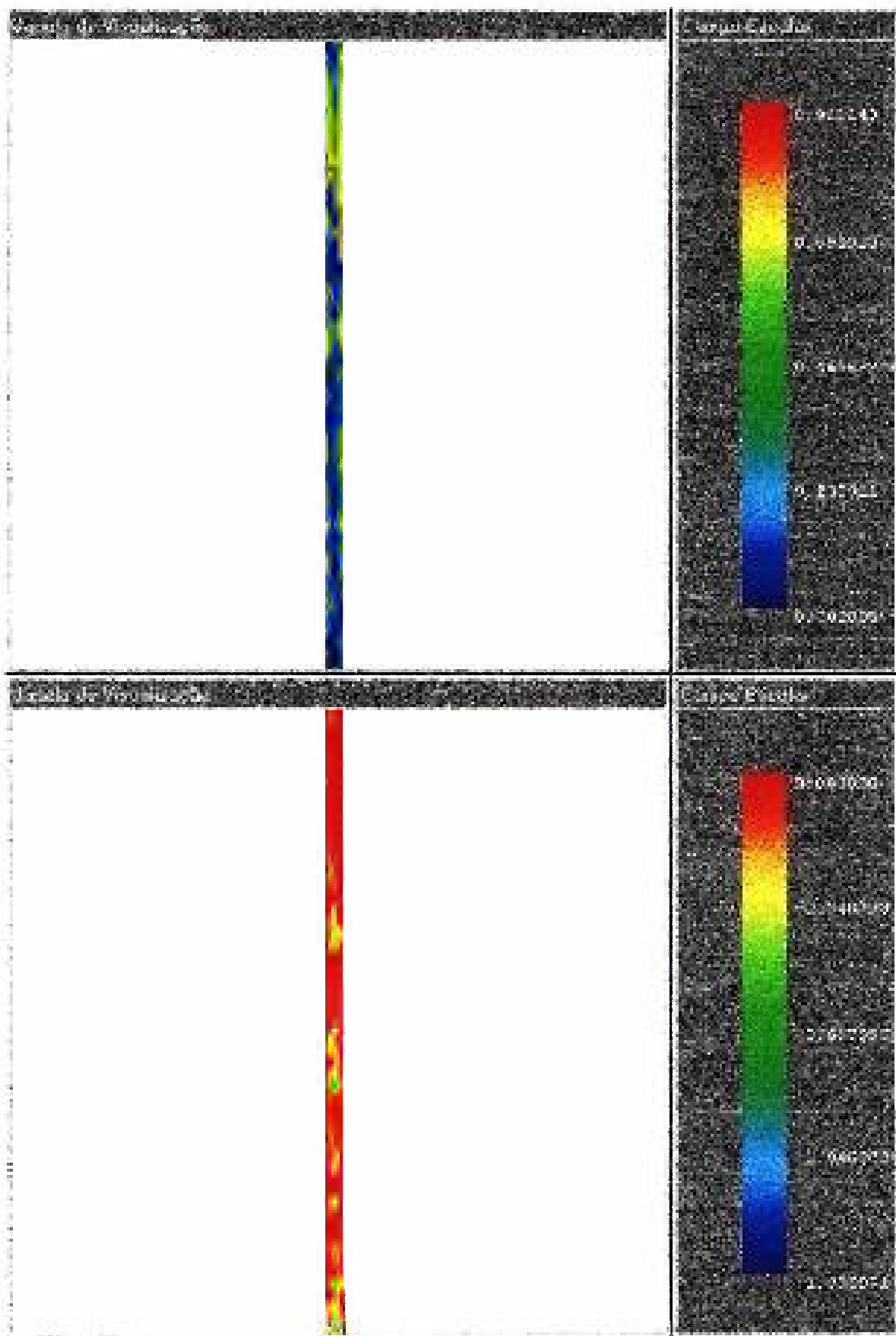


Figura 19 - De cima para baixo: Campos da fração de vazio (ϕ) e diferença de temperatura ($\Delta T_{sat} = T - T_{sat}$), no instante t_2 .

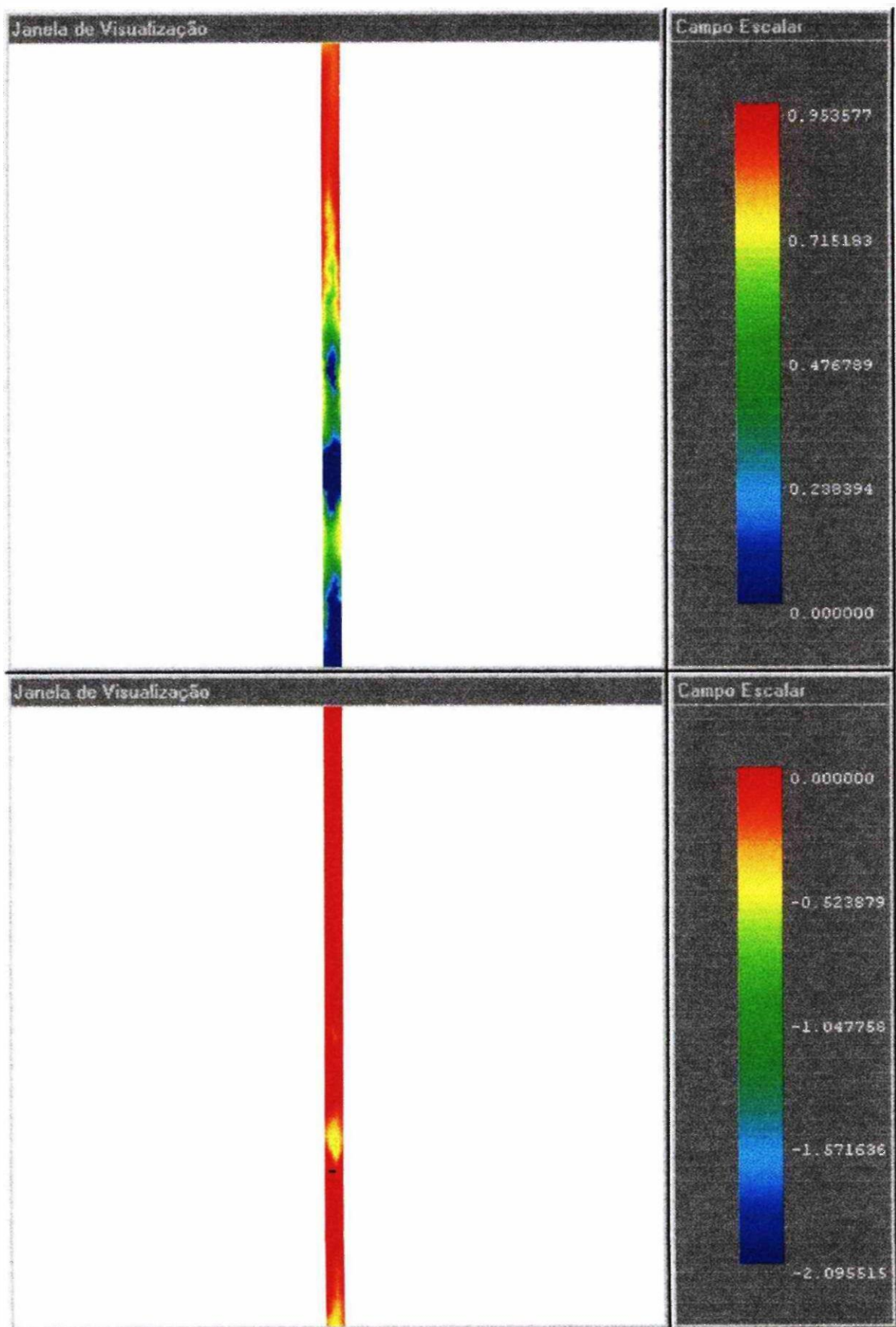


Figura 20 - De cima para baixo: Campos da fração de vazio (ϕ) e diferença de temperatura ($\Delta T_{sat} = T - T_{sat}$), no instante t_3 .

6 COMENTÁRIOS FINAIS

Uma nova formulação de elementos finitos para análise de escoamentos compressíveis e/ou quase-incompressíveis foi apresentada. Os vários termos de estabilização presentes na formulação (*streamline upwinding*, matriz de estabilização da pressão, etc...) aparecem de forma natural na derivação das equações discretizadas e não como mecanismos de dissipação artificial introduzidos *a posteriori*. O método mostrou bom comportamento na solução de problemas de dinâmica de gases e de escoamentos bifásicos água-vapor, abrangendo desde o regime subsônico até o regime supersônico.

Em particular, a formulação desenvolvida permite analisar problemas quase-incompressíveis, sem que seja preciso recorrer à aproximação incompressível. Assim, a equação de estado do fluido e seu comportamento termodinâmico não precisam ser descartados. Note que esta característica é imprescindível para viabilizar a metodologia bifásica adotada neste trabalho, onde a termodinâmica da mistura é modelada a partir do comportamento termodinâmico das fases.

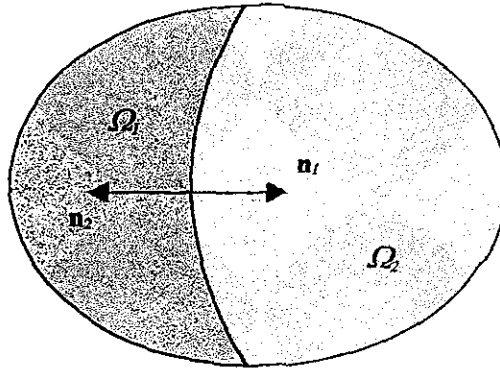
Do ponto de vista do esforço computacional, no limite incompressível a formulação adotada é apenas marginalmente mais dispendiosa que um algoritmo segregado especializado em escoamento incompressível [37]. Na nova formulação compressível/quase-incompressível é necessário efetuar cálculos adicionais que envolvem a equação de estado e a atualização da equação de energia em dois passos fracionados. Não obstante, para problemas incompressíveis, tanto no cálculo incompressível especializado quanto na formulação genérica adotada, o custo da análise é fortemente dominado pela atualização da pressão. Consequentemente, os esforços adicionais mencionados são relativamente pequenos.

Para a simulação de escoamentos bifásicos, o método utilizado parte dos balanços fundamentais da mecânica dos fluidos (ver apêndice A), e incorpora um modelo localmente homogêneo na definição das equações constitutivas que caracterizam a mistura. Por outro lado, são necessários modelos mais sofisticados para tensões turbulentas e para velocidade de deslizamento entre as fases para que se possa almejar resultados quantitativos confiáveis.

Cabe ressaltar que através de modelos localmente homogêneos e de técnicas de remalhagem adaptativa pode-se, em princípio, separar as duas fases dentro do domínio de análise. Dependendo da resolução da malha, grandes regiões de vapor e de água podem ser separadas umas das outras. Por outro lado, fenômenos bifásicos submalha ainda precisam ser modelados através da definição da mistura. Neste aspecto há uma clara analogia com as técnicas aplicadas para a simulação das grandes escalas de turbulência, onde as escalas submalha necessitam de modelos para o tensor de Reynolds. Tanto em um caso quanto no outro, a viabilização destas técnicas em instrumentos práticos de Engenharia depende do contínuo desenvolvimento dos computadores e dos métodos computacionais.

APÊNDICE A - MÉDIA VOLUMÉTRICA DAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO PARA ESCOAMENTO BIFÁSICO

Considere um volume de controle fixo Ω , contendo duas fases separadas por uma interface, como mostrado na figura A-1.



$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 ; \quad \Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$$

$$\Gamma = \partial \Omega$$

$$\Gamma_1 = \partial \Omega_1$$

$$\Gamma_2 = \partial \Omega_2$$

$$\Gamma_{1e} = \Gamma_1 \cap \Gamma$$

$$\Gamma_{2e} = \Gamma_2 \cap \Gamma$$

$$\Gamma_{int} = \Gamma_1 \cap \Gamma_2$$

Figura A-1 – Volume de controle contendo duas fases separadas por uma interface.

Embora Ω e Γ sejam fixos, os volumes Ω_1 , Ω_2 e a interface Γ_{int} podem variar no tempo.

1 Balanço de Massa

Condição de Salto na Interface para o Balanço de Massa

A conservação total de massa em $\Omega_1 + \Omega_2$ é

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1} \rho_1 \partial \Omega + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2} \rho_2 \partial \Omega + \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 1

Usando a regra de Leibniz (ver apêndice D) obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Gamma_1} \rho_1 \mathbf{v}_{\Gamma 1} \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Omega_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Gamma_2} \rho_2 \mathbf{v}_{\Gamma 2} \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 2

Levando-se em conta que a fronteira externa é fixa e que a interface tem velocidade \mathbf{v}_{Γ} ,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Omega_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Gamma_{int}} \rho_1 \mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \rho_2 \mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 3

Por outro lado, o balanço diferencial de massa é válido dentro de cada região Ω_k . Assim,

$$\int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 4

ou, pelo teorema da divergência,

$$\int_{\Omega_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Gamma_k} \rho_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 5

Somando a eq. A - 5 para as duas fases,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Omega_2} \frac{\partial \rho_2}{\partial t} \partial \Omega + \int_{\Gamma_{int}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & + \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 6

Subtraindo a eq. A - 3 da eq. A - 6, obtém-se a seguinte condição de salto na interface,

$$\int_{\Gamma_{in}} [\rho_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{v}_\Gamma) \cdot \mathbf{n}_1 + \rho_2 (\mathbf{u}_2 - \mathbf{v}_\Gamma) \cdot \mathbf{n}_2] \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 7

Média Volumétrica do Balanço de Massa

A média volumétrica da conservação de massa é dada por

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{k=1,2} \int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 8

onde a contribuição da fase k é

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} \partial \Omega + \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) \partial \Omega = 0$$

eq. A - 9

Usando a média definida no apêndice D:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} \partial \Omega + \langle \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \rangle_k = 0$$

eq. A - 10

Aplicando a regra de Leibniz e o teorema para a média de um divergente (apêndice D):

$$\frac{1}{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k} \rho_k \partial \Omega - \int_{\Gamma_k} \rho_k \mathbf{v}_{\Gamma k} \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \right] + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k}) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{in}} \rho_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 11

Lenbrando que a fronteira externa é fixa, enquanto que a interface tem velocidade \mathbf{v}_Γ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \rho_k \partial \Omega \right] - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k}) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 12

ou

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\Omega_k}{\Omega} \bar{\rho}_k \right] + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k}) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_\Gamma) \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 13

Note que a fração volumétrica da fase k é dada por

$$\alpha_k = \frac{\Omega_k}{\Omega}$$

eq. A - 14

assim, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_k \bar{\rho}_k] + \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k}) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_\Gamma) \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0$$

eq. A - 15

Somando a eq. A - 15 para as duas fases e considerando a condição de salto na interface (eq. A - 7), chega-se a seguinte forma para a eq. A-8,

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_1 \bar{\rho}_1 + \alpha_2 \bar{\rho}_2] + \nabla \cdot (\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2}) = 0$$

eq. A - 16

2 Balanço de Quantidade de Movimento

Condição de Salto na Interface para o Balanço de Quantidade de Movimento

Desprezando efeitos superficiais na interface, a conservação total de quantidade de movimento em $\Omega_1 + \Omega_2$ é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1} \rho_1 \mathbf{u}_1 \partial \Omega + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2} \rho_2 \mathbf{u}_2 \partial \Omega + \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma \\ & - \int_{\Gamma_{1e}} \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_{2e}} \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \int_{\Omega_1} \rho_1 \mathbf{g} \partial \Omega - \int_{\Omega_2} \rho_2 \mathbf{g} \partial \Omega = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 17

Usando a regra de Leibniz e notando que apenas a interface se move, obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 \mathbf{u}_1) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{in}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Omega_2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 \mathbf{u}_2) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{in}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & \int_{\Gamma_{1e}} \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{2e}} \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_{1e}} \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_{2e}} \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma \\ & - \int_{\Omega_1} \rho_1 \mathbf{g} \partial \Omega - \int_{\Omega_2} \rho_2 \mathbf{g} \partial \Omega = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 18

A equação diferencial para conservação de quantidade de movimento é válida dentro de cada região Ω_k , de modo que

$$\int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k) - \nabla \cdot \mathbf{T}_k - \rho_k \mathbf{g} \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 19

ou

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \mathbf{u}_k) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{ic}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \\ & - \int_{\Gamma_{iv}} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma - \int_{\Gamma_{im}} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma - \int_{\Omega_i} \rho_k \mathbf{g} \partial \Omega = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 20

Somando a eq. A - 20 para as duas fases e subtraindo o balanço de quantidade de movimento total dado pela eq. A - 18, obtém-se a seguinte condição de salto,

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma_{int}} [\rho_1 \mathbf{u}_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_1) - \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1] \partial \Gamma \\ & + \int_{\Gamma_{int}} [\rho_2 \mathbf{u}_2 (\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_2) - \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2] \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 21

Note que a equação acima foi obtida desprezando efeitos superficiais, tais como tensão superficial.

Média Volumétrica do Balanço de Quantidade de Movimento

A média volumétrica da conservação de quantidade de movimento, na ausência de efeitos superficiais, é

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{k=1,2} \int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{T} - \rho \mathbf{g} \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 22

onde o primeiro termo da equação acima, para a fase k , é

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) \partial \Omega &= \frac{1}{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k} (\rho \mathbf{u}) \partial \Omega - \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} (\rho \mathbf{u}) \partial \Omega \right] - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma\end{aligned}$$

eq. A - 23

ou

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) \partial \Omega = \frac{\partial}{\partial t} [\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k}] - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

Usando o teorema para a média de um divergente, o segundo termo da eq. A - 22 pode ser escrito como

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} [\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u})] \partial \Omega = \langle \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \rangle_k = \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k}) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. A - 24

Da mesma forma, o terceiro termo da eq. A - 22 pode ser escrito como

$$-\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} [\nabla \cdot \mathbf{T}] \partial \Omega = -\langle \nabla \cdot \mathbf{T} \rangle_k = -\nabla \cdot (\alpha_k \overline{\mathbf{T}_k}) - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

Finalmente, escreve-se o quarto termo da eq. A - 22 como

$$-\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \rho \mathbf{g} \partial \Omega = -\mathbf{g} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \rho \partial \Omega = -\alpha_k \overline{\rho_k} \mathbf{g}$$

eq. A - 25

Assim, a contribuição da fase k para a equação eq. A - 22 é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k} \right] + \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{T}_k} \right) - \alpha_k \overline{\rho_k} \mathbf{g} - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k \, \partial \Gamma + \\ & \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \rho_k \mathbf{u}_k (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k) \, \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 26

Somando a eq. A - 26 para ambas as fases e considerando o salto de quantidade de movimento (eq. A - 21), obtém-se a seguinte forma para a eq. A - 22:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2} \right] + \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2} \right) \\ & - \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{T}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{T}_2} \right) - \left(\alpha_1 \overline{\rho_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2} \right) \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 27

Usando a equação constitutiva para o tensor tensão,

$$\mathbf{T}_k = -P_k \mathbf{I} + \mathbf{S}_k$$

eq. A - 28

a equação de balanço de quantidade de movimento (eq. A - 27) torna-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2} \right) \\ & - \nabla \cdot \left[- \left(\alpha_1 \overline{P_1} + \alpha_2 \overline{P_2} \right) \mathbf{I} + \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{S}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{S}_2} \right) \right] - \left(\alpha_1 \overline{\rho_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2} \right) \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 29

3 Balanço de Energia

Condição de Salto na Interface para o Balanço de Energia

Desprezando efeitos superficiais na interface, a conservação total de energia em $\Omega_1 + \Omega_2$ é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_1} \rho_1 E_1 \partial \Omega + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_2} \rho_2 E_2 \partial \Omega + \int_{\Gamma_e} \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_e} \rho_2 E_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & \int_{\Gamma_e} \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_e} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_e} (\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1) \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_e} (\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2) \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \\ & \int_{\Omega_1} \rho_1 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_1 \partial \Omega - \int_{\Omega_2} \rho_2 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_2 \partial \Omega = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 30

Usando a regra de Leibniz e notando que somente a interface se move, tem-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_1 E_1) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{int}} \rho_1 E_1 \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Omega_2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 E_2) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{int}} \rho_2 E_2 \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \\ & \int_{\Gamma_e} \rho_1 E_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_e} \rho_2 E_2 \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_e} \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma + \int_{\Gamma_e} \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \\ & \int_{\Gamma_e} (\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n}_1) \cdot \mathbf{n}_1 \partial \Gamma - \int_{\Gamma_e} (\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n}_2) \cdot \mathbf{n}_2 \partial \Gamma - \int_{\Omega_1} \rho_1 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_1 \partial \Omega - \int_{\Omega_2} \rho_2 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_2 \partial \Omega = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 31

A equação diferencial de balanço de energia é válida dentro de cada região Ω_k . Desta forma,

$$\int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_k E_k) + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k E_k) + \nabla \cdot \mathbf{q}_k - \nabla \cdot (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{u}_k) - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 32

Aplicando o teorema da divergência, a equação acima torna-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_k} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k E_k) \partial \Omega + \int_{\Gamma_{ke}} \rho_k E_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \\
& + \int_{\Gamma_{ke}} \mathbf{q}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma + \int_{\Gamma_{int}} \mathbf{q}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \\
& - \int_{\Gamma_{ke}} (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k) \cdot \mathbf{u}_k \partial \Gamma - \int_{\Gamma_{int}} (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{n}_k) \cdot \mathbf{u}_k \partial \Gamma - \int_{\Omega_k} \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k \partial \Omega = 0
\end{aligned}$$

eq. A - 33

Somando a eq. A - 33 para ambas as fases e subtraindo o balanço total de energia dado pela eq. A - 31, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma_{int}} [\rho_1 E_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}_1 - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_1) + \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n}_1 - (\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{u}_1) \cdot \mathbf{n}_1] \partial \Gamma + \\
& \int_{\Gamma_{int}} [\rho_2 E_2 (\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_2 - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_2) - \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}_2 - (\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{n}_2] \partial \Gamma = 0
\end{aligned}$$

eq. A - 34

A condição de salto na interface para o balanço de energia mostrado acima foi obtido desprezando efeitos superficiais.

Média Volumétrica do Balanço de Energia

A média volumétrica da conservação de energia, na ausência de efeitos superficiais, é

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{k=1,2} \int_{\Omega_k} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{u}) - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \right] \partial \Omega = 0$$

eq. A - 35

Analisando o primeiro termo da equação acima, tem-se

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) \partial \Omega &= \frac{1}{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_k} (\rho E) \partial \Omega - \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} (\rho E) \partial \Omega \right] - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma\end{aligned}$$

eq. A - 36

ou

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) \partial \Omega = \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_k \overline{\rho_k E_k} \right] - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. A - 37

Usando o teorema para a média de um divergente, o segundo termo da eq. A - 35 pode ser escrito como

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} [\nabla \cdot (\rho E \mathbf{u})] \partial \Omega = \langle \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u}) \rangle_k = \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\rho_k E_k \mathbf{u}_k} \right) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. A - 38

O terceiro termo da eq. A - 35 pode ser escrito como

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} [\nabla \cdot \mathbf{q}] \partial \Omega = \langle \nabla \cdot \mathbf{q} \rangle_k = \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{q}_k} \right) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \mathbf{q}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. A - 39

Da mesma forma, o quarto termo da eq. A - 35 pode ser escrito como

$$-\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} [\nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{u})] \partial \Omega = -\langle \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{u}) \rangle_k = -\nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{u}_k} \right) - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

Finalmente, escreve-se o quinto termo da eq. A - 35 como

$$-\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_k} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \partial \Omega = -\frac{1}{\Omega} \left[\Omega_k \overline{\rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k} \right] = -\alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k}$$

eq. A - 40

Assim, a contribuição da fase k para o balanço total de energia eq. A - 35 torna-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_k \overline{\rho_k E_k} \right] + \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\rho_k E_k \mathbf{u}_k} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{q}_k} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha_k \overline{\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{u}_k} \right) - \alpha_k \overline{\rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_k} + \\ & \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \rho_k E_k (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{n}_k - \mathbf{v}_\Gamma \cdot \mathbf{n}_k) \partial \Gamma + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} \mathbf{q}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma - \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{int}} (\mathbf{T}_k \cdot \mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 41

Somando a eq. A - 41 para as duas fases e usando o salto de energia eq. A - 34, a conservação total de energia eq. A - 35 torna-se,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_1 \overline{\rho_1 E_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 E_2} \right] + \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 E_1 \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 E_2 \mathbf{u}_2} \right) + \\ & \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{q}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{q}_2} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{u}_2} \right) - \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_2} \right) = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 42

Usando a equação constitutiva eq. A - 28, a equação de balanço de energia (eq. A - 42) torna-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 E_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 E_2} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{u}_1 E_1} + \alpha_1 \overline{\mathbf{u}_1 P_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{u}_2 E_2} + \alpha_2 \overline{\mathbf{u}_2 P_2} \right) + \\ & \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{q}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{q}_2} \right) - \nabla \cdot \left(\alpha_1 \overline{\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{u}_2} \right) - \left(\alpha_1 \overline{\rho_1 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_1} + \alpha_2 \overline{\rho_2 \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_2} \right) = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 43

Equações Médias em Volume Locais

Fazendo-se o volume Ω tender a zero, as seguintes equações médias locais são obtidas a partir das equações eq. A-16, eq. A-29 e eq. A-43,

Conservação de massa

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) = 0$$

eq. A - 44

Conservação de quantidade de movimento

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2) + \\ & - \nabla \cdot [-(\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2) \mathbf{I} + (\alpha_1 \mathbf{S}_1 + \alpha_2 \mathbf{S}_2)] - (\alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2) \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 45

Conservação de energia

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 E_1 + \alpha_2 \rho_2 E_2) + \nabla \cdot \left(\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 \left(E_1 + \frac{P_1}{\rho_1} \right) + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2 \left(E_2 + \frac{P_2}{\rho_2} \right) \right) + \\ & - \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{u}_2) + \nabla \cdot (\alpha_1 \mathbf{q}_1 + \alpha_2 \mathbf{q}_2) - (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{u}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{u}_2) \cdot \mathbf{g} = 0 \end{aligned}$$

eq. A - 46

APÊNDICE B - REMALHAGEM ADAPTATIVA

Como mencionado na seção 4.5, neste trabalho usa-se o estimador de erro *a posteriori* proposto por ZIENKIEWICZ e ZHU [39] para estimar o erro do gradiente de velocidade e guiar a remalhagem. O esquema a ser apresentado a seguir é o mesmo utilizado por DE SAMPAIO e COUTINHO [40].

O erro do gradiente de velocidade é estimado de acordo com

$$\|E\|_{\Omega} = \left[\int_{\Omega} (\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a) (\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a) d\Omega \right]^{1/2}$$

eq. B - 1

onde $\nabla \hat{u}_a$ é o gradiente descontínuo obtido diretamente da análise e ∇u_a^* é o gradiente suavizado obtido da projeção de mínimos quadrados de $\nabla \hat{u}_a$ na base de elementos finitos C_0 [37].

Pode-se também definir a seguinte medida do gradiente de velocidade $\|S\|_{\Omega}$ e o erro relativo η

$$\|S\|_{\Omega} = \left[\int_{\Omega} \nabla u_a^* \nabla u_a^* d\Omega \right]^{1/2}$$

eq. B - 2

$$\eta = \frac{\|E\|_{\Omega}}{\|S\|_{\Omega}}$$

eq. B - 3

Se Ω_i é o sub-domínio associado a um elemento típico i , o erro correspondente a este elemento é

$$\|e\|_{\Omega_i} = \left[\int_{\Omega_i} (\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a) (\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a) d\Omega \right]^{1/2}$$

eq. B - 4

O erro no domínio, dado pela eq. B - 1, é formado pela soma dos erros nos elementos,

$$\|E\|_{\Omega}^2 = \sum_{i=1}^m \|e\|_{\Omega_i}^2$$

eq. B - 5

onde m é o número de elementos na malha.

Assim, pode-se calcular o erro médio por elemento \bar{e}_m como

$$\bar{e}_m = \frac{\|E\|_{\Omega}}{\sqrt{m}}$$

eq. B - 6

ou, em termos de erro relativo η ,

$$\bar{e}_m = \eta \frac{\|S\|_{\Omega}}{\sqrt{m}}$$

eq. B - 7

O esquema de remalhagem é baseado no conceito de geração de uma nova malha, de tal forma que o erro torne-se uniformemente distribuído entre os novos elementos. Isto requer a definição de um erro almejado por elemento, e conduz a várias estratégias alternativas.

Na referência [37], usa-se a estratégia proposta por ZIENKIEWICZ e ZHU [39] onde a eq. B - 7 é usada para definir o erro alvo por elemento para remalhagem, de acordo com a qualidade da análise prescrita pelo usuário $\bar{\eta}$. Este esquema é orientado para manter um nível de erro *quase* constante, enquanto que o número de elementos pode variar livremente. No procedimento de remalhagem que é apresentado a seguir, a prioridade é invertida. De fato, deixa-se o nível do erro ser ajustado durante a análise de acordo com uma definição prévia do usuário do máximo número de elementos que é permitido. Isto leva a uma implementação mais orientada para os limites de custo computacional do que a implementação adotada na referência [37], onde um número excessivo de elementos é algumas vezes criado.

Suponha que através de um esquema de remalhagem, iniciado a partir de uma malha grosseira contendo m elementos, possa-se obter uma malha refinada com m' elementos, de tal forma que $m' > m$. Assume-se também que a malha refinada é ótima no sentido de que o erro é uniformemente distribuído entre os m' elementos. Então, usando-se eq. B - 6, a razão entre o erro médio por elemento observado nestas malhas é

$$\bar{e}_{m'} / \bar{e}_m = \sqrt{m} \|E'\|_{\Omega} / \sqrt{m'} \|E\|_{\Omega}$$

eq. B - 8

Note que o erro no domínio na malha refinada ótima é menor que aquele na malha grosseira, assim conclui-se que

$$\bar{e}_{m'} / \bar{e}_m = \sqrt{m} / \sqrt{m''} \text{ para algum } m'' > m'$$

eq. B - 9

Em vista das observações acima, o seguinte erro almejado por elemento é escolhido para remalhagem

$$\bar{e}_t = \sqrt{\frac{m}{m''}} \bar{e}_m$$

eq. B - 10

onde m'' é o número de elementos máximo prescrito pelo usuário, m é o número de elementos na malha atual e \bar{e}_m é o erro médio por elemento observado na malha atual

Para os elementos lineares usados na computação, assume-se que os erros individuais dos elementos são proporcionais aos tamanhos dos elementos correspondentes. Assim, pode-se definir uma nova distribuição de tamanho de elementos buscando alcançar o erro alvo \bar{e}_i em cada elemento da nova malha. A nova distribuição de tamanho de elementos pode ser expressa em termos dos tamanhos dos elementos e dos erros na malha atual e do erro almejado \bar{e}_i para os elementos da nova malha:

$$h_i^{k+1} = h_i^k \frac{\bar{e}_i}{\|e\|_{\Omega_i}} \quad \text{para } i = 1, \dots, m$$

eq. B - 11

onde $k+1$ e k indicam a malha nova e a malha atual, respectivamente.

Em algumas aplicações é necessário limitar o tamanho mínimo aceitável (h_{min}), uma vez que o passo de tempo calculado pela eq. 4-80 pode tornar-se muito pequeno.

A eq. B - 11 dá uma distribuição descontínua dos tamanhos dos elementos para a nova malha que é, no entanto, definida na malha atual. O gerador de malhas usado neste trabalho requer que a distribuição de tamanhos de elementos seja contínua e definida nos nós de uma malha-base previamente especificada. Assim, a distribuição de tamanhos dada pela eq. B - 11 é projetada para os nós da malha atual, via suavização por mínimos quadrados, sendo então transferida para os nós da malha de base.

Um gerador de malhas do tipo Delaunay é empregado para construir malhas compostas por elementos triangulares. O problema é definido em uma malha inicial contendo condições de contorno e iniciais. A malha inicial é usada como malha-base a partir da qual todas as malhas subsequentes serão geradas pela inserção de novos pontos e pela aplicação do algoritmo de Bowyer [47] para conectar os novos pontos em uma

triangulação de Delaunay. No procedimento de remalhagem adotado neste trabalho a malha-base é a primeira malha computacional.

A remalhagem automática é controlada pela variação do erro relativo dado pela eq. B - 3. Uma nova malha é construída sempre que o erro relativo variar mais do que um por cento durante a análise transiente.

APÊNDICE C - PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DA MISTURA BIFÁSICA

1 Equação de estado para a mistura bifásica

Definindo-se a fase 1 da mistura como a fase de líquido (l) e a fase 2 com a fase de vapor (g), e considerando-se que no modelo proposto (seção 2.3) as velocidades de ambas as fases são consideradas iguais ($u_l = u_g$), tem-se uma relação para a qualidade de vapor (x) e a fração de vazio (ϕ) [50]:

$$\frac{1-x}{x} = \frac{(1-\phi)\rho_l}{\phi\rho_g}$$

eq. C - 1

onde, por definição, a qualidade de vapor é

$$x = \frac{h - h_l}{h_g - h_l}$$

eq. C - 2

Assim, uma equação de estado da mistura pode ser escrita, usando as equações acima e a equação para a densidade do modelo proposto (eq. 2-34)

$$\rho_m = \frac{\rho_l}{1 + \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} - 1 \right) \frac{(h - h_l)}{h_{lg}}}$$

eq. C - 3

2 Propriedades de transporte

Existem várias expressões para se modelar propriedades de transporte da mistura [50]. No entanto, neste trabalho a viscosidade da mistura (μ) e a condutividade térmica (κ) são dadas por:

$$\mu = (1 - \phi) \mu_l + \phi \mu_g$$

eq. C - 4

$$\kappa = (1 - \phi) \kappa_l + \phi \kappa_g$$

eq. C - 5

3 Cálculo de α

Como formulação genérica apresentada foi escrita em termos das propriedades termodinâmicas α (eq. 4-8) e β (eq. 4-9), é necessário obter os valores dessas propriedades para os vários estados termodinâmicos da mistura bifásica.

A partir da (eq. 4-8) escreve-se

$$\alpha = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_e \frac{\partial v}{\partial v} = \frac{\partial \rho}{\partial v} \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_e = -\frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_e$$

eq. C - 6

onde v é o volume específico

- Para a região de líquido subresfriado e vapor superaquecido

Escrevendo $e(P, T)$ e considerando a energia interna constante ($\partial e = 0$)

$$\partial e = \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T \partial P + \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_P \partial T = 0$$

eq. C - 7

Assim, da equação acima tem-se:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_e = -\frac{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T}{\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P}$$

eq. C - 8

Escrevendo $v(P, T)$

$$\partial v = \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T \partial P + \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \partial T$$

eq. C - 9

ou

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_e = \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P \frac{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T}{\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P}$$

eq. C - 10

Por definição, a energia interna específica é dada por [51]

$$e = h - P v$$

eq. C - 11

Derivando a equação acima, tem-se

$$\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial h}{\partial P}\right)_T - P \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T - v \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_P - P \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_P$$

eq. C - 12

Assim pode-se escrever

$$\alpha = -\frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T - \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P - \frac{\left(\frac{\partial h}{\partial P} \right)_T - P \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T - v}{\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P - P \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P}$$

eq. C - 13

- Para a região de mudança de fase

Pode-se escrever o volume específico da mistura como [52]

$$v = v_l + x (v_g - v_l)$$

eq. C - 14

Da equação acima escreve-se

$$\partial v = \frac{\partial v_l}{\partial P} \partial P + \left(\frac{\partial v_g}{\partial P} - \frac{\partial v_l}{\partial P} \right) x \partial P + (v_g - v_l) \partial x$$

eq. C - 15

A energia interna da mistura é dada por [50]:

$$e = e_l + x (e_g - e_l)$$

eq. C - 16

Assim, derivando a equação acima

$$\partial e = \frac{\partial e_l}{\partial P} \partial P + \left(\frac{\partial e_g}{\partial P} - \frac{\partial e_l}{\partial P} \right) x \partial P + (e_g - e_l) \partial x$$

eq. C - 17

Sendo a energia interna constante ($\partial e = 0$), a equação acima torna-se

$$\partial x = - \frac{\frac{\partial e_l}{\partial P} + \left(\frac{\partial e_g}{\partial P} - \frac{\partial e_l}{\partial P} \right) x}{(e_g - e_l)} \partial P$$

eq. C - 18

Substituindo a eq. C - 18 na eq. C - 15

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_v = \frac{\partial v_l}{\partial P} + \left(\frac{\partial v_g}{\partial P} - \frac{\partial v_l}{\partial P} \right) x - (v_g - v_l) \left(\frac{\frac{\partial e_l}{\partial P} + \left(\frac{\partial e_g}{\partial P} - \frac{\partial e_l}{\partial P} \right) x}{(e_g - e_l)} \right)$$

eq. C - 19

onde

$$\left(\frac{\partial e_l}{\partial P} \right)_T = \left(\frac{\partial h_l}{\partial P} \right)_T - P \left(\frac{\partial v_l}{\partial P} \right)_T - v_l \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial e_g}{\partial P} \right)_T = \left(\frac{\partial h_g}{\partial P} \right)_T - P \left(\frac{\partial v_g}{\partial P} \right)_T - v_g$$

eq. C - 20

Escreve-se α como

$$\alpha_{\text{sat}} = - \frac{1}{v^2} \left[\frac{\partial v_l}{\partial P} + \left(\frac{\partial v_g}{\partial P} - \frac{\partial v_l}{\partial P} \right) x - (v_g - v_l) \left(\frac{\frac{\partial e_l}{\partial P} + \left(\frac{\partial e_g}{\partial P} - \frac{\partial e_l}{\partial P} \right) x}{(e_g - e_l)} \right) \right]$$

eq. C - 21

4 Cálculo de β

A partir da (eq. 4-9) escreve-se

$$\beta = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial e} \right)_p = \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial e} \right)_p$$

eq. C - 22

- Para a região de líquido subresfriado e vapor superaquecido

$$\left(\frac{\partial v}{\partial e} \right)_p = \frac{\left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p}{\left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_p}$$

eq. C - 23

Usando a eq. C - 12, eq. C - 22 e eq. C - 23, tem-se

$$\beta = \frac{1}{v^2} \left[\frac{\left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p}{\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p - P \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p} \right]$$

eq. C - 24

- Para a região de mudança de fase

Escrevendo $v = v(P, x)$ e considerando a pressão constante, da eq. C - 14 tem-se:

$$\partial v = (v_g - v_l) \partial x$$

eq. C - 25

Da mesma forma,

$$\partial e = (e_g - e_l) \partial x$$

eq. C - 26

Da eq. C - 25 e eq. C - 26 escreve-se

$$\left(\frac{\partial v}{\partial e} \right)_p = \frac{(v_g - v_l)}{(e_g - e_l)}$$

eq. C - 27

Finalmente da eq. C - 22, tem-se

$$\beta_{\text{sat}} = \frac{1}{v^2} \frac{(v_g - v_l)}{(e_g - e_l)}$$

eq. C - 28

Deve-se observar que tanto α quanto β foram escritas em função das variáveis e suas derivadas que podem ser obtidas diretamente da tabela de vapor (*steam table*) [51].

APÊNDICE D - REGRA DE LEIBNIZ, GRADIENTE MÉDIO E DIVERGENTE MÉDIO

1 Regra de Leibniz

Considere o volume de controle Ω , com fronteira Γ e vetor normal apontado para fora \mathbf{n} .

Assim,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi \, \partial \Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \, \partial \Omega + \int_{\Gamma} \phi \, \mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n} \, \partial \Gamma$$

eq. D - 1

onde $\mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{n}$ é a velocidade de deslocamento de Γ .

2 Gradiente Médio e Divergente Médio

De acordo com a figura A-1, define-se as médias

$$\langle \phi \rangle_k = \frac{1}{\Omega_k} \int_{\Omega_k} \phi \, \partial \Omega$$

eq. D - 2

$$\overline{\phi}_k = \frac{1}{\Omega_k} \int_{\Omega_k} \phi \, \partial \Omega$$

eq. D - 3

Note que

$$\Omega \langle \phi \rangle_k = \Omega_k \overline{\phi}_k$$

eq. D - 4

Assim

$$\langle \phi \rangle_k = \alpha_k \overline{\phi_k}$$

eq. D - 5

onde α_k é a fração de volume da fase k .

$$\alpha_k = \frac{\Omega_k}{\Omega}$$

eq. D - 6

De acordo com SLATTERY [10]

$$\langle \nabla \phi \rangle_k = \nabla \langle \phi \rangle_k + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \phi_k \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. D - 7

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f} \rangle_k = \nabla \cdot \langle \mathbf{f} \rangle_k + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. D - 8

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{B} \rangle_k = \nabla \cdot \langle \mathbf{B} \rangle_k + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. D - 9

ou

$$\langle \nabla \phi \rangle_k = \nabla \left(\alpha_k \overline{\phi_k} \right) + \frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \phi_k \mathbf{n}_k \partial \Gamma$$

eq. D - 10

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{f} \rangle_k = \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\mathbf{f}_k}) + \frac{1}{\Omega_{\Gamma_{\text{int}}}} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{n}_k \, \partial \Gamma$$

eq. D - 11

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{B} \rangle_k = \nabla \cdot (\alpha_k \overline{\mathbf{B}_k}) + \frac{1}{\Omega_{\Gamma_{\text{int}}}} \int_{\Gamma_{\text{int}}} \mathbf{B}_k \cdot \mathbf{n}_k \, \partial \Gamma$$

eq. D - 12

REFERÊNCIAS

- [1] DE SAMPAIO, P. A. B., "Finite Element Modeling of Complex Nuclear Engineering Flows". In: *Anais do V Congresso Geral de Energia Nuclear*, pp. 269-274. Rio de Janeiro, 1994.
- [2] LORENZ, J.J. AND CARLSON, R.D., "An Investigation of Buoyancy-Induced Flow Stratification in a Cylindrical Plenum", In: *Proceedings of the Heat Transfer and Fluid Mechanics Institute*. Stanford University Press, pp. 270-283, 1976.
- [3] CHUNG, K.S., BEZELLA, W.A., THOMPSON, D.H. AND TESSIER, J.H., "Analytical and Experimental Simulation of LMFBR Decay Heat Removal by Natural Circulation Heat Transfer", In: *Decay Heat Removal and Natural Convection in Fast Breeder Reactors*, Agrawal and Guppy, Eds., Hemisphere Publishing, 1981.
- [4] COSTA, L.E. AND IDELSOHN, S.R., "Análisis de Problemas Termohidráulicos en Cañerías utilizando el Método de Elementos Finitos", In: *Proceedings of the III Brazilian Symposium on Piping and Pressure Vessels, (SIBRAT)*, Salvador, BA, Brasil, pp. 291-308, 1984.
- [5] SUN, J.G., SHEN, Y.H. AND SHA, W.T., *Analysis of Flow Stratification in the Surge Line of the Comanche Peak Reactor*, NUREG/CR-5456, Argonne National Laboratories, 1991.
- [6] HIRSCH, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Volume 1. A Wiley - Interscience Publication, 1990.
- [7] SPENCER, A. J. M., *Continuum Mechanics*. Longman, 1980.
- [8] PERAIRE, J., ZIENKIEWICZ, O. C. AND MORGAN, K., "Shallow Water Problems: A general Explicit Formulation". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 22, pp. 547-574, 1986.
- [9] SCHLICHTING, H., *Boundary Layer Theory*. McGraw-Hill, 1971.
- [10] SLATTERY, J. C., *Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua*. McGraw-Hill, 1972.
- [11] HAUKE, G. AND HUGHES, T. J. R., *A Comparative Study of Different Sets of Variables for Solving Compressible and Incompressible Flows*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Final Draft, 1998.

- [12] KARKI, K. C. AND PATANKAR, S. V., "Pressure Based Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds in Arbitrary Configurations". *AIAA Journal*, Vol. 27, pp. 1167-1174, 1989.
- [13] MALISKA, C. R. AND SILVA, A. F. C., *A Boundary-Fitted Finite Volume Method for the Solution of Compressible and/or Incompressible Fluid Flows using both Velocity and Density Corrections in Finite Elements in Fluids*. T.J. Chung and G. Karr, Eds., Huntsville Press, pp. 257-266, 1989.
- [14] CHEN, K. H. AND PLETCHER, R. H., "Primitive Variable, Strongly Implicit Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds". *AIAA Journal*, Vol. 29, pp. 1241-1249, 1991.
- [15] AZEVEDO, J. L. F. AND MARTINS, R. J., "Compressible and Incompressible Flow Simulations using a Finite Difference Method". In: *Proceedings of the 5th International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, , pp. 38-43. Sendai, Japan ,1993.
- [16] ZIENKIEWICZ, O. C. AND CODINA, R., "A General Algorithm for Compressible and Incompressible Flow. Part I: The Split, Characteristic-Based Scheme". *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, Vol. 20, 869-885, 1995.
- [17] PEYRET, R. AND TAYLOR, T. D., *Computacional Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag, USA, 1983.
- [18] HIRSCH, C., *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Volume 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows, A Wiley - Intercience Publication, 1990.
- [19] PIRONNEAU, O., *Finite Element Methods for Fluids*. John Wiley & Sons, 1989.
- [20] SPEZIALE, C., *Turbulence Modeling in Non-Inertial Frames of Reference*. ICASE report 88-18.
- [21] JOHNSON, A. A. AND TEZDUYAR, T.E. , "Parallel Computation of Incompressible Flows with Complex Geometries". *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, Vol. 24, 1321-1340, 1997.
- [22] LESIER, M., *Turbulence in Fluids*. Kluwer Academic Publishers, Holland, 1990.
- [23] LAPA, N. S., 1998, *Um Novo Algoritmo Computacional para Análise Termohidráulica de Plantas Industriais*, Tese de Mestrado, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

- [24] DELHAYE, J. M., GIOT, M. AND RIETHMULLER, M. L., *Thermohydraulics of Two-Phase Systems for Industrial Design and Nuclear Engineering*. Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [25] ANDERSON, A. A., TANNEHILL, I. C., E PLETCHER, R. H., *Computacional Fluid Mechanics and Heat Transfer*. 1 ed., New York, Hemisphere Publishing Corp., 1984.
- [26] JOHNSON, C., *Numerical Solutions of Partial Diferential Equations by the Finite Element Method*, Cambridge University Press, 1987.
- [27] ZIENKIEWICZ, O. C., QU, C., TAYLOR, R. L. E NAKAZAWA, S., "The Patch Test for Mixed Formulation". *Int. Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 23, pp. 1873-1883, 1986.
- [28] HUGHES, T. J. R., FRANCA L. P. AND BALLESTRA M., "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi Condition: A Stable Petrov-Galerkin Formulation of the Stokes Problem Accomodating Equal-Order Interpolation". *Computational Methods in Applied Mechanics and Enginnering*. Vol. 59, pp.85-99, 1986.
- [29] DE SAMPAIO, P. A. B., "A Petrov-Galerkin Formulation for the Incompressible Navier-Stokes Equations using Equal Order Interpolation for Velocity and Pressure". *Int. Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 31, pp. 1135-1149, 1991.
- [30] ZIENKIEWICZ, O. C. AND WU, J., " Incompressibility without Tears – How to Avoid Restrictions of Mixed Formulation". *Int. J. Num. Meth. in Engineering*, Vol. 32, 1189-1203, 1991.
- [31] KARAM, J. e LOULA, A. F. D., "New Mixed Petrov-Galerkin Finite Element Formulations for Incompressible Flow". In: *Anais do II Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, 172-175, 1988.
- [32] KARAM, J. e LOULA, A. F. D., "Stability of a Mixed Petrov-Galerkin Finite Element Formulation for Incompressible Flow". In: *Anais XI Congresso Nacional de Matemática Aplicada*, 1988.
- [33] HUGHES, T. J. R. and FRANCA, L. P. , "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: VII. The Stokes Problem with Various Well-Posed Boundary Conditions: Symetric Formulations that Converge for All Velocity/Pressure Spaces". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 65, 85-96, 1987.

- [34] DE SAMPAIO, P. A. B. AND COUTINHO, A. L. G. A., "Parallel/Vector Finite Element Simulation of Coupled Flow and Heat Transfer". In: *Proc., 16th Iberian Latin American Conference on Computational Methods for Engineering*, Curitiba, Brazil, 1401-1410, 1995.
- [35] BROOKS, A. AND HUGHES, T. J. R., "Streamline Upwind / Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations". *Comp.Meth..Appl.Mech.Eng.*, Vol. 32, 199-259, 1982.
- [36] HUGHES, T. J. R., "Recent Progress in the Development and Understanding of SUPG Methods with Special Reference to the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations". *Int.J. Num. Meth. in Fluids*, Vol. 7, 1261-1275, 1987.
- [37] DE SAMPAIO, P. A. B., LYRA, P. R. M., MORGAN, K. AND WEATHERILL, N. P., "Petrov-Galerkin Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations in Primitive Variables with Adaptive Remeshing". *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 106, 143-178, 1993.
- [38] DE SAMPAIO, P. A. B., "Transient Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations in Primitive Variables Employing Optimal Local Time-Stepping". In: *Proceedings of the 8th International Conference on Numerical Methods for Laminar and Turbulent Flow*, C. Taylor, Ed., Pineridge Press, Swansea, UK, Vol. 8(2), 1493-1504, 1993.
- [39] ZIENKIEWICZ, O. C. AND . ZHU, J. .Z. , "A Simple Error Estimator and Adaptive Procedure for Practical Engineering Analysis". *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 24, 337-357, 1987.
- [40] DE SAMPAIO, P. A. B. AND COUTINHO, A. L. G. .A., "Simulation of Free and Forced Convection Incompressible Flows using an Adaptive Parallel/Vector Finite Element Procedure". *Int.J. Num. Meth. in Fluids* (to appear).
- [41] BLEVINS, R.D., *Flow Induced Vibrations*. Van Nostrand Reinhold Company, 1977.
- [42] *FLOTRAN Benchmark Manual*. Compuflo, Inc., 1991.
- [43] DeVahl, G. D., "Natural Convection of Air in a Square Cavity. A Benchmark Numerical Solution". *Int.J. Num. Meth. in Fluids*, Vol. 3, 249-264, 1983.
- [44] NIGRO, N., STORTI, M., IDELSOHN, S., ".GMRES Physics-Based Preconditioner for All Reynolds and Mach Numbers: Numerical Examples". *Int.J. Num. Meth. in Fluids*, Vol. 25, pp. 1347-1371, 1997.

- [45] SHAKIB, F., 1988, *Finite Element Analysis of the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations*. PhD. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Stanford University
- [46] DUTTO, L.C., 1990, *Etude de Preconditionnements pour la Resolution, par la Methode des Elements Finis, des Equations de Navier-Stokes pour un Fluide Compressible*. These pour obtenir le titre de Docteur de L'Universite, Universite Pierre et Marie Curie, France.
- [47] ALLÈGRE, M., RAFFIN, M., LENGRAND, J. C., "Experimental Flowfields around NACA0012 Airfoils Located in Subsonic and Supersonic Rarefied Air Streams". In: *Numerical Simulation of Compressible Navier-Stokes Flows, a GAMM-Workshop, Notes on Numerical Fluids Mechanics*, Vol. 18, M. O. Bristeau, R. Glowinski, J. Périaux, H. Viviani (eds.), pp. 59-68, 1987.
- [48] FERNG, Y. M., CHIENG C. C., PAN C., "Predictions of Rewetting Process for a Nuclear Fuel Rod using First-Principles Equations". *Nuclear Engineering and Design*, vol. 126, pp. 189-205, (1991).
- [49] BOWYER, A., "Computing Dirichlet Tessellations". *The Computer Journal*, Vol. 24, pp. 162-166, 1981.
- [50] WALLIS, G. B., *One-Dimensional Two-Phase Flow*. McGraw Hill (1969).
- [51] VAN NISS, S., *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. McGraw-Hill Kogakusha, LTD, 1975.
- [52] COLLIER, J. G., *Convective Boiling and Condensation*. McGraw-Hill Book Company (1972).